Opción ChemStation OpenLAB de Agilent



Guía de conceptos

Agilent Technologies

Avisos

Número de referencia del manual:

G2170-95036

Edición

04/2010

Impreso en Alemania

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

Revisión de software

Esta guía es válida para la revisión B.04.02 SP1 o posterior del software de la Agilent ChemStation.

Microsoft ® es una marca registrada de Microsoft Corporation en EE.UU.

Garantía

El material contenido en este documento se proporciona "tal como es" y está sujeto a modificaciones, sin previo aviso, en ediciones futuras. Además, hasta el máximo permitido por la ley aplicable, Agilent rechaza cualquier garantía, expresa o implícita, en relación con este manual y con cualquier información contenida en el mismo, incluyendo, pero no limitado a, las garantías implícitas de comercialización y adecuación a un fin determinado. En ningún caso Agilent será responsable de los errores o de los daños incidentales o consecuentes relacionados con el suministro, utilización o uso de este documento o de cualquier información contenida en el mismo. En el caso que Agilent y el usuario tengan un acuerdo escrito separado con condiciones de garantía que cubran el material de este documento y que estén en conflicto con estas condiciones, prevalecerán las condiciones de garantía del acuerdo separado.

Licencias sobre la tecnología

El hardware y/o software descritos en este documento se suministran bajo una licencia y pueden utilizarse o copiarse únicamente de acuerdo con las condiciones de tal licencia.

Avisos de seguridad

PRECAUCIÓN

Un aviso de **PRECAUCIÓN** indica un peligro. Llama la atención sobre un procedimiento de operación, una práctica o similar que, si no se realizan correctamente o no se ponen en práctica, pueden provocar daños en el producto o pérdida de datos importantes. No avance más allá de un aviso de **PRECAUCIÓN** hasta que se entiendan y se cumplan completamente las condiciones indicadas.

ADVERTENCIA

Un aviso de ADVERTENCIA indica un peligro. Llama la atención sobre un procedimiento de operación, una práctica o similar que, si no se realizan correctamente o no se ponen en práctica, pueden provocar daños personales o la muerte. No avance más allá de un aviso de ADVERTENCIA hasta que se entiendan y se cumplan completamente las condiciones indicadas.

Sólo para uso en investigación.

En esta guía...

Esta guía contiene información de referencia y sobre la instalación de la opción ChemStation OpenLAB G2189BA, la interfaz del Gestor de contenidos empresariales (ECM) entre Agilent ChemStation y un sistema cliente/servidor de ECM de Agilent.

1 Introducción

En este capítulo se presenta ECM, la implantación de la opción OpenLAB en ChemStation y los requisitos de la norma 21 CFR, Parte 11.

2 Instalación:

En este capítulo se describe la instalación y configuración de la opción ChemStation OpenLAB.

3 Conceptos básicos de la opción ChemStation OpenLAB

En este capítulo se describe cómo iniciar la sesión en ECM en ChemStation y se explican los elementos y barras de herramientas de la interfaz de usuario relacionados con ECM, así como los parámetros principales de las preferencias.

4 Trabajar con la opción ChemStation OpenLAB

En este capítulo se describen los flujos de trabajo básicos con la opción ChemStation OpenLAB. Hay cuatro flujos de trabajo relacionados con los datos y dos para los métodos y plantillas de secuencias.

5 Administración respecto a la con- formidad con la norma 21 CFR, Parte 11

En este capítulo se explica el objetivo de la norma 21 CFR, Parte 11, y su implantación en ChemStation con la opción ChemStation OpenLAB.

6 Campos personalizados

En este capítulo se explica para qué se utilizan los campos personalizados en ChemStation y cómo se utilizan.

7 Tratamiento de datos heredados de ChemStation y de la migración de datos desde ChemStore

En este capítulo se proporciona información sobre la migración de datos de secuencias heredados de ChemStation a formato de contenedor de secuencias con el fin de que sea posible la carga de estos conjuntos de datos en ECM.

8 Interfase para el generador de informes de inteligencia de OpenLAB

En este capítulo se proporciona información sobre la integración del generador de informes de inteligencia de OpenLAB en Agilent ChemStation.

9 Servicios de extracción de atributos de datos de ChemStation

En este capítulo se describen los servicios de extracción de atributos de ECM (AES) para datos de ChemStation. El AES extrae información de metadatos de los archivos de datos de ChemStation. Estos metadatos permiten la búsqueda de los datos de ChemStation. Para obtener más información, consulte la documentación de ECM.

10 Uso de servicios de impresión en ChemStation

En este capítulo se describe de forma breve cómo instalar y configurar los servicios de impresión. Dicho servicio permite cargar automáticamente los informes de ChemStation en ECM en formato PDF.

11 Diagnóstico y resolución de problemas

En este capítulo se ofrecen algunas sugerencias elementales de diagnóstico y solución de problemas.

12 Apéndice

Contenido

1 Introducción 9

Definición de ECM 10
Módulo de expansión para ChemStation: Opción OpenLAB 11
Almacenamiento de datos en ECM 16
Conformidad con la norma 21 CFR, Parte 11 17

2 Instalación: 19

Requisitos 20
Compatibilidad 21
Tareas de instalación y configuración en un servidor de ECM 22
Instalación de tareas en el ordenador de ChemStation 28
Desinstalación 37

3 Conceptos básicos de la opción ChemStation OpenLAB 39

Permisos de usuario 40
Interfase de usuario de la opción OpenLAB en ChemStation 43
Preferencias de ECM 46
Ruta de datos remotos como secuencia de parámetros 56
Formatos de archivo comprimido de ChemStation 58

4 Trabajar con la opción ChemStation OpenLAB 59

Transferencia de datos a o desde ECM 60
Flujos de trabajo relacionados con los datos 61
Flujos de trabajo para métodos y plantillas de secuencias 73

5 Administración respecto a la con- formidad con la norma 21 CFR, Parte 11 81

Introducción a la norma 21 CFR, Parte 11 82
Introducción de los pasos de configuración necesarios para la Parte 11 85
Registro de auditorías y libros de registro 87
Administración en ECM 93
Administración de los parámetros de ChemStation 97
Firma electrónica 101

6 Campos personalizados 105

Acerca de los campos personalizados 106
Configuración de campos personalizados 107
Especificación de valores de campos personalizados 110
Elaboración de informes de campos personalizados 112
Reprocesamiento con campos personalizados 114

7 Tratamiento de datos heredados de ChemStation y de la migración de datos desde ChemStore 115

Introducción 116
Migración del contenedor de secuencias 117
Conversión de los datos migrados desde ChemStore 119

8 Interfase para el generador de informes de inteligencia de OpenLAB 121

Introducción 122
Interfase de componentes relacionados con OpenLAB IR 130

9 Servicios de extracción de atributos de datos de ChemStation 133

Servicios de extracción de atributos de datos de ChemStation 134
Filtro ACAML 137
Servicio de extracción de atributos XML de ChemStation 138
Filtro de ChemStation 139

10 Uso de servicios de impresión en ChemStation 141

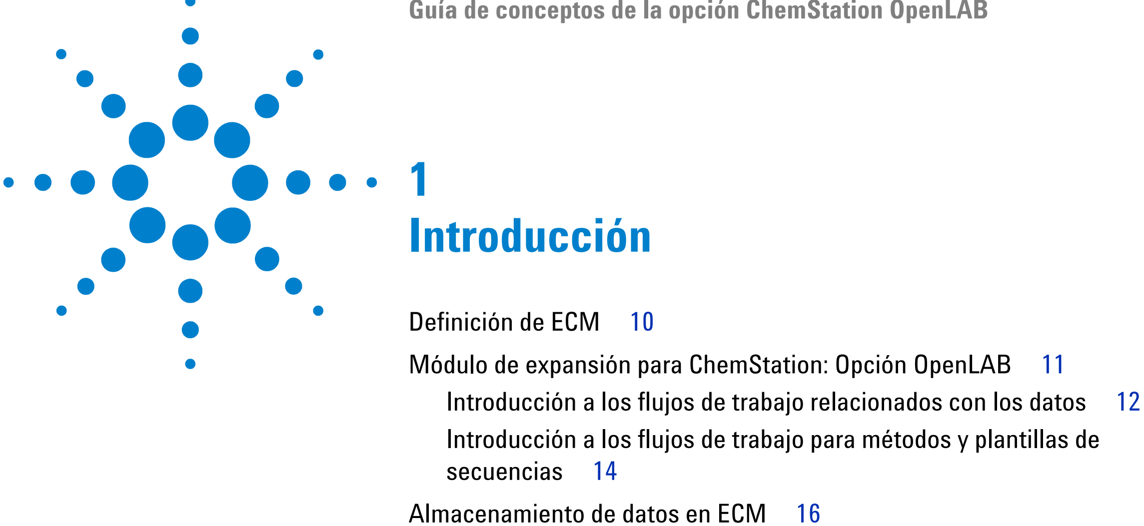
Servicios de impresión de ECM 142
Configuración de Servicios de impresión de ECM 143
Configuración de Servicios de impresión de ECM para usarlos con Amyuni PDF Converter 144
Configuración de Servicios de impresión de ECM - Adobe Distiller 146
Trabajar con Servicios de impresión de ECM en ChemStation 148

11 Diagnóstico y resolución de problemas 149

Problemas generales 150
Alertas y mensajes de error durante el arranque de ChemStation 151
Mensajes de error en el administrador de cola del spooler 152

12 Apéndice 155

Privilegios de ChemStation en ECM 156
Funciones de ChemStation en ECM 159
Privilegios relacionados con ECM respecto a la configuración de ChemStation 163



1
Introducción

Definición de ECM 10
Módulo de expansión para ChemStation: Opción OpenLAB 11
Introducción a los flujos de trabajo relacionados con los datos 12
Introducción a los flujos de trabajo para métodos y plantillas de secuencias 14
Almacenamiento de datos en ECM 16
Conformidad con la norma 21 CFR, Parte 11 17

En este capítulo se presenta ECM, la implantación de la opción OpenLAB en ChemStation y los requisitos de la norma 21 CFR, Parte 11.

Definición de ECM

El Gestor de contenidos empresariales (ECM) de Agilent es una biblioteca electrónica basada en la web que permite archivar y catalogar archivos electrónicos de forma segura. ECM permite almacenar e indexar datos primarios analíticos, informes y cualquier otro tipo de documento. Los archivos almacenados pueden compartirse con otros usuarios.

Puede almacenarse cualquier tipo de archivo electrónico como, por ejemplo, documentos de Microsoft Office, documentos PDF de Adobe, imágenes y gráficos moleculares, así como datos primarios e informes generados con ChemStation.

ECM permite recopilar, organizar, buscar y revisar fácilmente todos los datos. Extrae automáticamente los metadatos que pueden buscarse en archivos y proporciona funciones de búsqueda eficaces. Además, ECM incorpora visores integrados para muchos tipos de archivo.

La interfase del ECM se abre con Microsoft Internet Explorer, también conocido como cliente web de ECM.

Módulo de expansión para ChemStation: Opción OpenLAB

A partir de la revisión B.02.01 SR1, Agilent ChemStation proporciona una interfase para el Gestor de contenidos empresariales (ECM) de Agilent que permite almacenar datos analíticos e informes en una ubicación segura. Desde ChemStation, puede conectarse a ECM y almacenar allí métodos, plantillas de secuencias, archivos de datos e informes. El almacenamiento de datos puede ser automático (es decir, al final de un análisis o secuencia individual) o manual. Los datos de ChemStation guardados en ECM podrán descargarse posteriormente en ChemStation para su revisión o reprocesamiento.

Asimismo, la opción ChemStation OpenLAB ofrece funciones que permiten a los usuarios cumplir la normativa 21 CFR, Parte 11 así como otras similares sobre registros y firmas electrónicas:

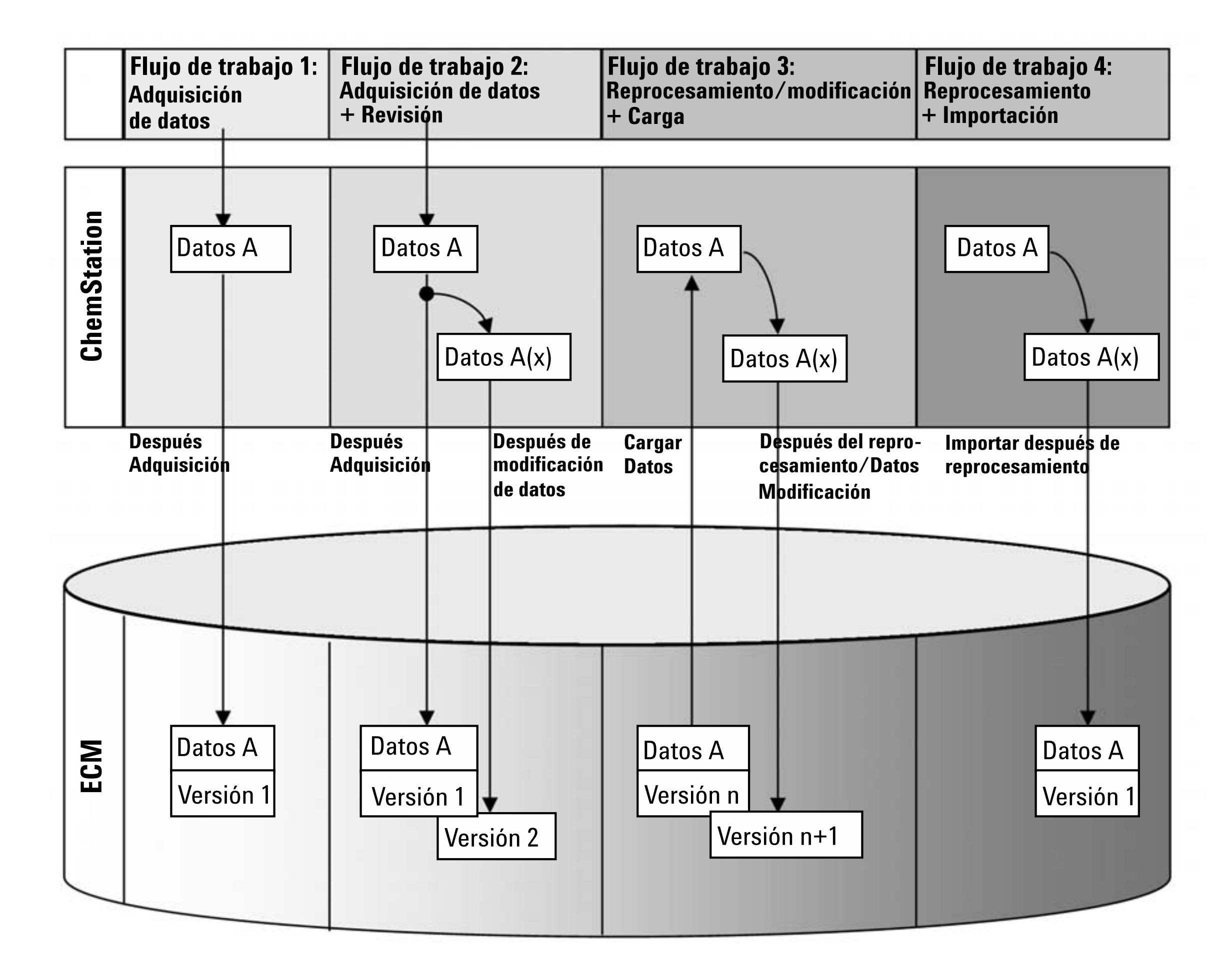
- Inicio de sesión obligatorio/conexión con ECM
- Bloqueo de sesión configurable
- Funciones de usuario y privilegios configurables de ChemStation
- Seguimiento completo de los datos mediante registros de auditoría de métodos y resultados
- Versionado completo de los datos

La opción ChemStation OpenLAB precisa los siguientes componentes:

- Servidor de ECM
- Opción ChemStation OpenLAB instalada en el servidor de ECM
- Cliente web de ECM instalado en el ordenador de ChemStation
- ChemStation con la opción ChemStation OpenLAB instalada en el ordenador de ChemStation
- Conexión entre el ordenador de ChemStation y el servidor de ECM

A continuación, se enumeran los principales flujos de trabajo para la transferencia de datos primarios, así como los métodos y las plantillas de secuencias. Estos flujos de trabajo indican las actividades del sistema en relación con los procesos de trabajo.

Introducción a los flujos de trabajo relacionados con los datos



Flujo de trabajo 1: Adquisición de datos primarios y transferencia automática a ECM

1 Los datos primarios analíticos se adquieren mediante ChemStation.
2 Los datos primarios se cargan automáticamente en ECM utilizando las definiciones de ruta configuradas inmediatamente después de finalizar el análisis o la secuencia individual.
3 En la ubicación definida de ECM se crea un conjunto de datos de ECM.

Flujo de trabajo 2: Revisión sin conexión durante una adquisición

1 Los datos primarios analíticos se adquieren mediante ChemStation.

2 Mientras la adquisición aún está en curso, se modifica parte de los datos con una ChemStation fuera de línea.

3 Los datos primarios se cargan automáticamente en ECM utilizando las definiciones de ruta configuradas inmediatamente después de finalizar el análisis o la secuencia individual.

   En la ubicación definida de ECM se crea un conjunto de datos de ECM.

4 Una vez finalizado el trabajo en la ChemStation fuera de línea, los datos modificados también se cargan automáticamente en ECM.

   Se crea otra versión del conjunto de datos de ECM.

Flujo de trabajo 3: Reprocesamiento de datos y carga automática en ECM

1 Los datos analíticos existentes se cargan de ECM a ChemStation.

2 Los datos se reprocesan en ChemStation.

3 Éstos se cargan automáticamente en ECM. Las definiciones de ruta originales de los datos descargados de ECM definen la ubicación en ECM.

4 Allí se crea una nueva versión de los datos.

Flujo de trabajo 4: Importación después del reprocesamiento

1 Los datos analíticos existentes se abren localmente.

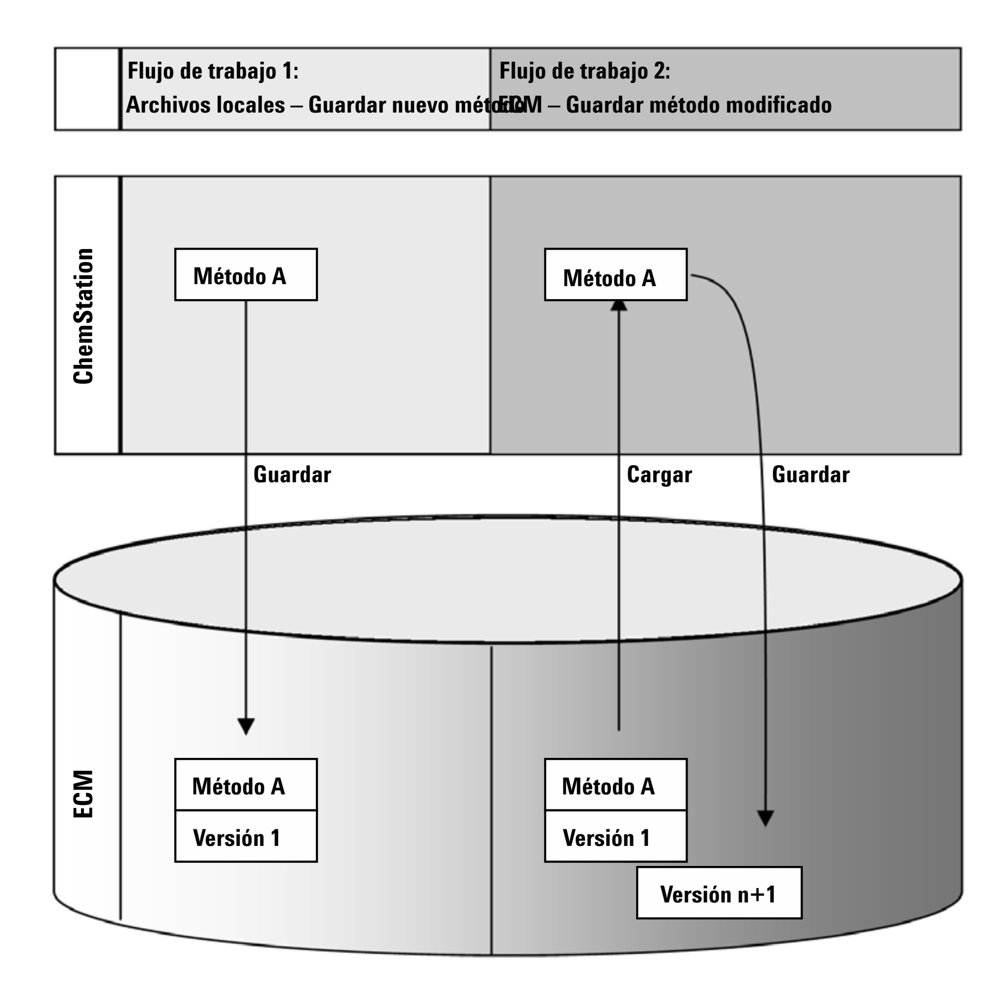
2 Los datos se reprocesan en ChemStation.

3 Después del reprocesamiento, los datos se cargan automáticamente en ECM. Las preferencias actuales de ChemStation definen la ubicación en ECM.

4 Allí se crea una nueva versión de los datos.

Para obtener más información y conocer otros flujos de trabajo, consulte “Flujos de trabajo relacionados con los datos” en la página 61

Introducción a los flujos de trabajo para métodos y plantillas de secuencias



Flujo de trabajo 1: Carga de un nuevo método

1 Se crea un método o plantilla de secuencia.
2 El método o plantilla de secuencia se carga en ECM a través de la ruta seleccionada por el usuario.
3 La versión 1 del método o plantilla de secuencia se crea automáticamente en ECM.

Flujo de trabajo 2: Almacenamiento de un método modificado

1. Desde ECM se carga un método o plantilla de secuencia existente.
2. El método o la plantilla de secuencia modificada se guarda en ECM.
3. Se crea automáticamente en ECM una nueva versión del método o plantilla de secuencia.

Para obtener más información y conocer otros flujos de trabajo, consulte "Flujos de trabajo para métodos y plantillas de secuencias" en la página 73

Almacenamiento de datos en ECM

ECM facilita un modelo de almacenamiento de datos de cuatro niveles con la estructura Ubicación, Archivador, Cajón, Carpeta. Los nombres de Ubicación, Archivador, Cajón y Carpeta forman el nombre de la ruta (denominada ruta LCDF, por sus siglas en inglés, o ruta de datos remotos) de la ubicación de almacenamiento. Los datos sólo se almacenan en el nivel Carpeta.

La estructura del contenido del programa de ECM se parece a habitaciones llenas de archivadores. Cada archivador tiene varios cajones, que a su vez contienen carpetas colgantes. Por último, los archivos en papel se guardan en las carpetas. La estructura LCDF puede crearse con el cliente web de ECM. Además, se pueden crear Ubicaciones, Archivadores, Cajones y Carpetas adicionales siguiendo la ruta de datos remotos de ChemStation. En ChemStation, también se pueden establecer señales predefinidas para los Cajones y las Carpetas.

En la vista de árbol de ECM, las ubicaciones están marcadas con el icono de una casa. Dentro de cada Ubicación, los Archivadores se indican con el icono de un archivador. Dentro de cada Archivador, los Cajones están identificados con el icono de un cajón. Por último, dentro de cada Cajón, las Carpetas se marcan con el icono de una carpeta. Toda la estructura de contenido aparece en el libro Contenido.

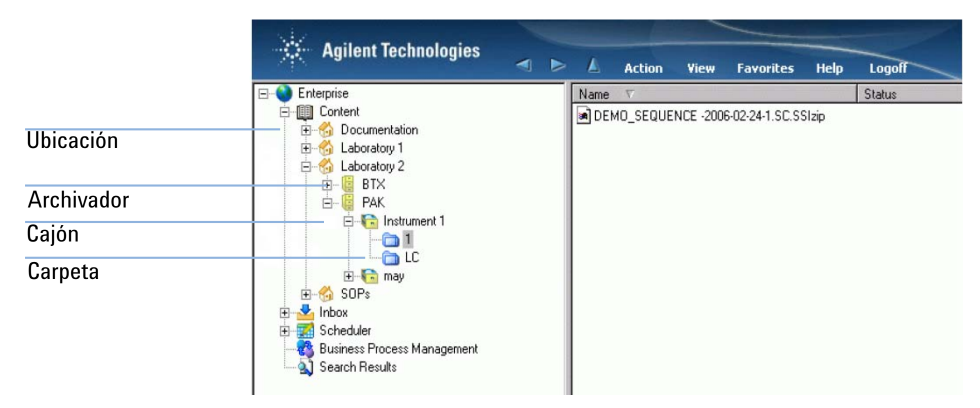


Figura 1 Estructura LCDF en ECM

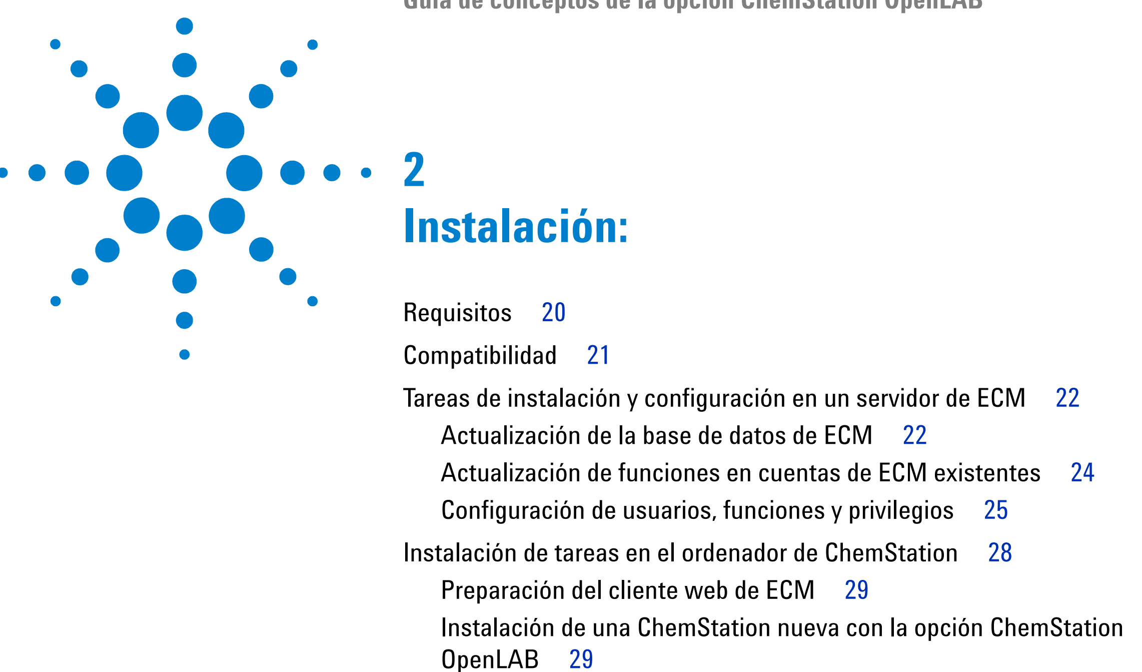
Los objetos cargados sólo pueden almacenarse en el nivel más bajo (es decir, Carpeta). No se puede cargar datos en otros niveles de la jerarquía.

Conformidad con la norma 21 CFR, Parte 11

En vigor desde el 20 de agosto de 1997, la Administración de alimentos y fármacos (FDA) de EE.UU. emitió y publicó una nueva ley para permitir a las empresas farmacéuticas autorizar sus resultados con firmas electrónicas y transferir la documentación en papel a registros electrónicos. Esta norma se conoce como Código 21 de Regulaciones Federales, Parte 11, (denominada 21 CFR, Parte 11) y se aplica a todos los sectores industriales regulados por la FDA.

La norma 21 CFR, Parte 11, incluye las directrices federales de EE.UU. para el almacenamiento y protección de registros electrónicos y la aplicación de firmas electrónicas. El objetivo de estas directrices es garantizar que los registros electrónicos sujetos a las mismas sean fiables, auténticos y mantengan los más altos niveles de integridad.

La opción ChemStation OpenLAB con ChemStation B.04.xx facilita los controles necesarios para administrar el acceso al sistema, las funciones de registros de auditoría, el versionado de datos de ChemStation y las funciones de firma electrónica. ECM de OpenLAB de Agilent garantiza un mantenimiento de registros y archivado de datos seguro. Además, se ha probado e implantado en muchas de las empresas de biociencia más importantes para cumplir los mandatos de la norma 21 CFR, Parte 11.



2
Instalación:

Requisitos 20

Compatibilidad 21

Tareas de instalación y configuración en un servidor de ECM 22

- Actualización de la base de datos de ECM 22
- Actualización de funciones en cuentas de ECM existentes 24
- Configuración de usuarios, funciones y privilegios 25

Instalación de tareas en el ordenador de ChemStation 28

- Preparación del cliente web de ECM 29
- Instalación de una ChemStation nueva con la opción ChemStation OpenLAB 29
- Incorporación de la opción ChemStation OpenLAB a una ChemStation existente 33
- Permitir a los usuarios iniciar la herramienta de administración de ChemStation 34

Desinstalación 37

- Para desinstalar Agilent ChemStation con Windows XP 37
- Para desinstalar otros componentes de ChemStation 37

En este capítulo se describe la instalación y configuración de la opción Chem-Station OpenLAB.

Requisitos

Antes de instalar la opción ChemStation OpenLAB de Agilent, asegúrese de que se cumplan los siguientes requisitos:

- Es necesario instalar y configurar el software del servidor de ECM tal como se describe en la *Guía de instalación del Gestor de contenidos empresariales*. En la guía se explican todos los requisitos relacionados con el servidor, así como los datos de instalación y configuración.

  Las versiones de ECM compatibles con ChemStation son:

  - OpenLAB ECM Workgroup 3.3.1 - MS SQL Server 2005, con ECM 3.3.1, Revisiones 1-5,
  - OpenLAB ECM Enterprise con ECM 3.3.1 Revisiones 31, 45, 47-54, 56-57, 59 y 70,
  - OpenLAB ECM Workgroup 3.3.2 SP1 - MS SQL Server 2005,
  - OpenLAB ECM Enterprise 3.3.2 SP1 - MS SQL Server 2005, o bien
  - OpenLAB ECM Enterprise 3.3.2 SP1 - Oracle 10.2.0.1 o Servidor de base de datos de Oracle 10.2.0.4 con el cliente Oracle 10.2.0.1
- Asegúrese de que se cumplen los requisitos mínimos de PC y de funcionamiento para ChemStation. En el manual *Instalación de ChemStation*, puede encontrar información detallada sobre su instrumento.
- La configuración de la conexión entre ChemStation y el servidor de ECM precisa la dirección del servidor de ECM.

Compatibilidad

Expansiones de ChemStation

La opción ChemStation OpenLAB no se admite en combinación con las siguientes expansiones y funciones de ChemStation:

- ChemStore/Security Pack
- Purify
- Easy Access
- ChemStation **Unique Folder Creation OFF** (no se puede acceder al elemento)

Tareas de instalación y configuración en un servidor de ECM

Es necesario ejecutar el script de base de datos para los privilegios de ChemStation en el servidor de ECM a fin de implantar usuarios, funciones y privilegios relacionados con ChemStation en ECM de OpenLAB. Asimismo, después de la instalación del programa, hay que tener precaución con varios parámetros de ECM.

Actualización de la base de datos de ECM

El *DVD de ChemStation* incluye un script de base de datos que crea los privilegios específicos y las funciones de ChemStation en ECM. El procedimiento depende del tipo de base de datos de ECM (Oracle o SQLServer).

Requisitos previos

Se requieren los datos de inicio de sesión de los siguientes usuarios:

- Un usuario de Windows que pueda conectarse a la base de datos de ECM.
- Un usuario de la base de datos de ECM que tenga autorización para acceder al esquema ECM y actualizar sus tablas.

Para actualizar una base de datos de ECM de Oracle

1. Inicie la sesión en un ordenador con Windows que tenga instalado *SQLPlus*.
2. Introduzca el *DVD de ChemStation* en la unidad de DVD. Vaya a la carpeta ECM-DatabaseScript\Oracle.
3. Si dispone de la contraseña del SYS de usuario de la base de datos, ejecute InstallOracle.cmd. De no ser así, ejecute InstallOracleNonSYS.cmd.

   Se abrirá una ventana de comandos.
4. Se le pedirá que introduzca varios parámetros. Indique los datos necesarios y pulse **Enter** (Intro) para confirmar cada entrada:
   - **Database name (host string):** la cadena del host de la base de datos de ECM.
   - **User name**: sólo se pedirá un nombre de usuario si ejecuta InstallOracleNonSYS.cmd.

- **Path and filename of the log file**: se creará un archivo de registro de instalación en la ubicación indicada.
- **Password for database user**: la contraseña no se muestra mientras se escribe.
- **Schema/user name for ECM**
- **Directories** en los que se deben almacenar los archivos de datos, de indexación y de mapeado del nuevo esquema de base de datos.

5 Revise los datos.
   - Si algo no es correcto: pulse **Ctrl+C** para cancelar la instalación.

6 Si todo es correcto: Pulse **Enter** (Intro).

   La instalación dará comienzo. Una vez finalizada, aparece el texto **Installation finished** en la ventana de comandos.

7 Pulse cualquier tecla para cerrarla.

8 Compruebe el archivo de registro de la instalación. Sólo debe incluir mensajes sobre el cambio de la base de datos, no advertencias ni errores.

Para actualizar una base de datos de ECM de SQLServer

1 Inicie la sesión en un cliente que tenga instalado *SQLCmd*.

2 Introduzca el *DVD de ChemStation* en la unidad de CD-ROM. Vaya a la carpeta EMC-DatabaseScript\SQLServer.

3 Si dispone de la contraseña de SA de usuario de la base de datos, ejecute InstallSQL.cmd. De no ser así, ejecute InstallSQLNonSA.cmd.

   Se abrirá una ventana de comandos.

4 Se le pedirá que introduzca varios parámetros. Indique los datos necesarios y pulse **Enter** (Intro) para confirmar cada entrada:
   - **ECM Database Server**: nombre del servidor de la base de datos de ECM.
   - **ECM Database Name**
   - **Database User Name**: por norma general: **CYBERLABLOGIN**
   - **Directory and Name for log file**: se creará un archivo de registro de instalación en la ubicación indicada.

5 Revise los datos.
   - Si algo no es correcto: pulse **Ctrl+C** para cancelar la instalación.

6 Si todo es correcto: Escriba la contraseña del usuario de la base de datos que se indicó anteriormente.

   La instalación dará comienzo. Una vez finalizada, aparece el texto **Installation finished** en la ventana de comandos.

7 Pulse cualquier tecla para cerrarla.

8 Compruebe el archivo de registro de la instalación. Sólo debe incluir mensajes sobre el cambio de la base de datos, no advertencias ni errores.

Actualización de funciones en cuentas de ECM existentes

Al actualizar la base de datos de ECM, se crean determinadas funciones y privilegios específicos de ChemStation. Al crear una cuenta de ECM, estas funciones y sus privilegios estarán disponibles automáticamente en dicha cuenta. Sin embargo, si desea usar la opción ChemStation OpenLAB con una cuenta de ECM existente, es necesario actualizar primero las funciones en esa cuenta específica. Las nuevas funciones de ChemStation y sus privilegios sólo estarán disponibles después de actualizar las funciones de la cuenta existente.

Cómo conseguir que las nuevas funciones y privilegios estén disponibles en una cuenta de ECM

NOTA

Todas funciones de sistema se restaurarán a su configuración predeterminada al ejecutar **Reset Role**. Si ha realizado cambios manuales en una función del sistema, dichos cambios se perderán.

Se eliminarán todas las demás funciones creadas manualmente.

1 Abra una ventana del navegador y conéctese al servidor web de ECM.

2 Conéctese a la cuenta de ECM en la que desee actualizar las funciones.

3 Seleccione la ficha **Administration**.

4 Haga clic en **Account Administration**.

5 Haga doble clic en **Users / Groups / Roles**.

   Se abrirá el cuadro de diálogo **Account Administration**.

6 Seleccione la ficha **Roles**.

7 Haga clic en **Reset Roles**.

Las funciones predeterminadas de ChemStation, así como los privilegios correspondientes, (consulte “Funciones de ChemStation en ECM” en la página 159) ya están disponibles en la cuenta actual y pueden asignarse a los usuarios.

NOTA

Las funciones predeterminadas de ChemStation no cuentan con ningún privilegio de ECM. Es necesario asignar adicionalmente las funciones de ECM necesarias para un usuario de ChemStation que quiera acceder a ECM (consulte “Asignación de funciones” en la página 26 y “Privilegios relacionados con ECM respecto a la configuración de ChemStation” en la página 163).

Configuración de usuarios, funciones y privilegios

Concepto de usuarios, funciones y privilegios

En ECM, es posible crear usuarios de ECM específicos o utilizar los usuarios de Windows. Cada usuario puede ser miembro de un grupo específico. Los grupos disponibles dependen de la configuración de ECM.

Debe asignarse una función de ECM específica a cada grupo. También es posible asignar funciones a usuarios únicos; sin embargo, por razones de transparencia, se recomienda asignar funciones sólo a nivel de grupo.

Las funciones disponen de numerosos privilegios específicos que definen lo que los usuarios pueden ver o hacer en ECM y en ChemStation.

NOTA

Una vez creado un usuario, grupo o función de ECM, ya no es posible volver a eliminarlo. Sólo podrá desactivarse el elemento no usado.

Funciones y privilegios predeterminados

Hay una serie de funciones y privilegios predeterminados en ECM que se crean durante la instalación de ECM y de la opción ChemStation OpenLAB. En las tablas que aparecen a continuación se muestra una visión general de estas funciones y privilegios.

Nombre	Descripción
• Comienza por ":**CS**"	Función predeterminada de ChemStation. Puede restablecerse con la función Restaurar funciones.
• Comienza por ":"	Función predeterminada de ECM. Puede restablecerse con la función Restaurar funciones.

Nombre	Descripción
• Comienza por "**CS**:"	Privilegio relacionado con ChemStation Para obtener más información sobre los privilegios de ChemStation, consulte "Apéndice" en la página 155.
• Comienza por "**Content**:"	Privilegio relacionado con ECM
• Comienza por "**System**:"	Privilegio relacionado con ECM

Asimismo, se puede crear funciones propias en ECM u otorgar privilegios adicionales a las funciones predeterminadas. Para obtener más información, consulte la Guía del administrador de ECM.

Asignación de funciones

El usuario no necesita ninguna función específica para iniciar la sesión en ECM. Sin embargo, para que los usuarios vean una Ubicación, Archivador, Cajón o Carpeta determinada en la interfase de usuario, deben disponer, como requisito mínimo, de la función **:Reader**. Como resultado, es posible que los usuarios de dominio que no tengan funciones globales no puedan ver nada del contenido a no ser que se les otorguen los privilegios adecuados.

Debe asignarse la función **:Contributor** a los usuarios de la opción ChemStation OpenLAB. Esto puede hacerse a nivel global para toda la cuenta de ECM o individualmente para carpetas específicas (consulte "Funciones y carpetas" en la página 96). La función **:Contributor** permite a los usuarios de la opción ChemStation OpenLAB ver y agregar contenido a ECM. Dicha función **:Contributor** deberá mejorarse con el privilegio **Content: Add Folder** agregar carpeta. Este privilegio permite a los usuarios de ChemStation ECM agregar carpetas a la jerarquía de LCDF.

NOTA Si la función no incluye el privilegio **Add Folder**, los usuarios no podrán agregar una nueva Ruta de datos remotos (LCDF) en ChemStation.

Además de las funciones de ECM, los usuarios de la opción ChemStation OpenLAB deben tener asignada al menos una de las funciones de ChemStation u otra función personalizada de acuerdo con los privilegios de ChemStation. En el Apéndice se incluye una lista completa de todas las funciones de ChemStation y todos los privilegios correspondientes.

NOTA Si un usuario de ChemStation no tiene privilegios de ChemStation en ECM, dicho usuario no podrá trabajar con la opción ChemStation OpenLAB.

Instalación de tareas en el ordenador de ChemStation

La opción ChemStation OpenLAB (G2189BA) es un paquete de instalación independiente incluido en el *DVD de ChemStation*. Se puede instalar inicialmente con el software de ChemStation o agregarse a una instalación de ChemStation existente. Tras la instalación, la opción ChemStation OpenLAB estará disponible para todas las instancias de ChemStation instaladas en el PC cliente determinado.

Preparación del cliente web de ECM

Preparaciones Es necesario asegurarse de que el ordenador con ChemStation disponga de una versión actualizada del cliente web de ECM.

NOTA Si usa *Windows Vista*: Antes de conectarse a ECM, asegúrese de que la función **User Account Control** está deshabilitada.

Para preparar el cliente web de ECM

1 En el ordenador de ChemStation: Abra una ventana del navegador y conéctese al servidor web de ECM.
2 Inicie la sesión en ECM.

   Se instalan automáticamente todas las revisiones importantes. Durante la instalación, es posible que se le pida que reinicie el ordenador de ChemStation.

Instalación de una ChemStation nueva con la opción ChemStation OpenLAB

Antes de instalar el software, compruebe que se cumplan todos los requisitos (consulte “Requisitos” en la página 20)

La instalación se divide en los siguientes pasos:

- Instalación de los datos ECM API
- Instalación de ChemStation
- Incorporación de instrumentos
- Suministro de claves de licencia
- Configuración de instrumentos

Para instalar los datos ECM API

1 Introduzca el *DVD de ChemStation* en la unidad de DVD.
2 En el Explorador de Windows, navegue a la carpeta [diskdrive]:\ECMAPI y haga doble clic en el archivo ECMAPIDeploy.mci.

Se abrirá el asistente para la instalación de API de ECM de OpenLAB de Agilent.

3 Haga clic en **Next**.

4 Escriba el nombre de usuario y la organización. Seleccione la opción para instalar los datos API para **"Anyone who uses this computer (all users)"**. Haga clic en **Next**.

5 Seleccione una carpeta de destino en la que desee instalar los datos ECM API (la carpeta predeterminada es C:\Archivos de programa\Agilent Technologies\ECM API\1.0.24.1). Haga clic en **Next**.

6 Haga clic en **Install**.

7 Una vez completada la instalación, haga clic en **Finish**.

Para instalar ChemStation

1 Introduzca el *DVD de ChemStation* en la unidad de DVD.

2 En el menú Inicio de la barra de tareas, seleccione **Start > Run**.

3 En la línea de comandos, escriba
`[unidad de disco]:\Setup` Por ejemplo: D:\Setup

El software de instalación comprueba si los siguientes componentes de software están disponibles:

- Microsoft .NET Framework 3.5 SP1
- PDF-XChange 4.0

4 Si faltan componentes, se abren cuadros de diálogo adicionales para instalar dichos componentes. Haga clic en **Install** para instalar los componentes que faltan. Para instalar el Microsoft .NET Framework, lea y muestre su conformidad también con el contrato de licencia.

Una vez instalados esos componentes, se abre el **Agilent ChemStation Setup Wizard**.

5 Haga clic en **Next**.

6 Marque la casilla de verificación para confirmar el acuerdo de licencia. Haga clic en **Next**.

7 Seleccione una carpeta de destino en la que quiera instalar la nueva ChemStation (la carpeta predeterminada es C:\Chem32). Haga clic en **Next**.

8 Haga clic en **Install**.

Ya se está instalando ChemStation. Puede tardar varios minutos.

9 Haga clic en **Finish**.

Se abrirá el cuadro de diálogo **Setup Wizard - Instruments**. Proceda ahora a agregar los instrumentos.

Para agregar instrumentos

1 En el cuadro de diálogo **Setup Wizard - Instruments**, haga clic en los botones **Add** para añadir los instrumentos necesarios.

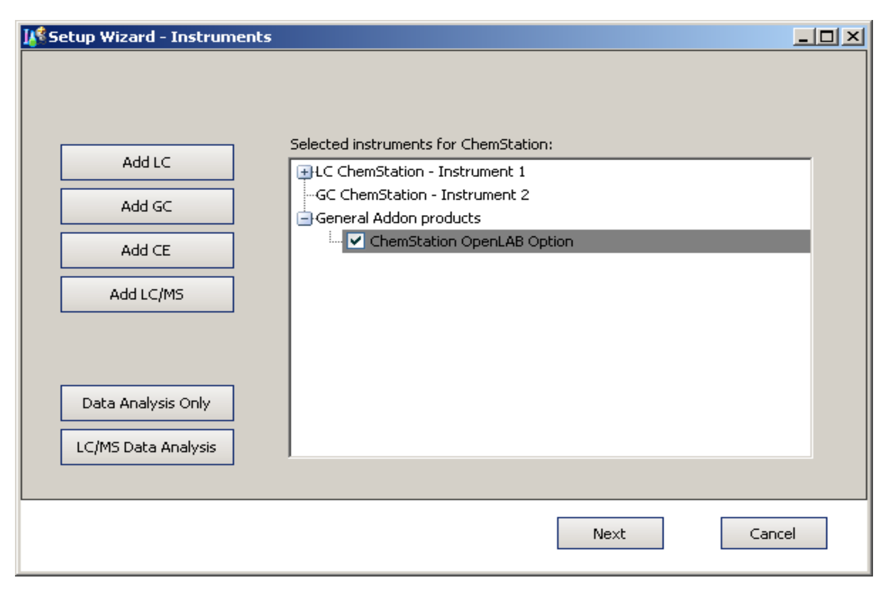


Figura 2 Asistente de instalación - Instrumentos

2 En **General Addon products**, marque la casilla **ChemStation OpenLAB Option**.

3 Haga clic en **Next**.

Se abre el cuadro de diálogo **Setup Wizard - Licenses**.

4 Proceda ahora a facilitar las claves de licencia.

Para proporcionar claves de licencia

1 En el cuadro de diálogo **Setup Wizard - Licenses**, introduzca una clave de licencia válida para la opción ChemStation OpenLAB en el campo de entrada de la parte inferior.

NOTA Los números de producto y licencia aplicables están impresos en el paquete de certificación y registro de software.

NOTA Tenga en cuenta que cualquier usuario de Windows con privilegios de administrador puede eliminar la licencia de la opción OpenLAB G2189BA y, de esta forma, deshabilitar la funcionalidad de esta opción desde ChemStation. Por lo tanto, se recomienda que un entorno sin regular los usuarios de ChemStation trabajen como usuarios de Windows o usuarios avanzados.

2 Haga clic en **Add** para añadir una clave de licencia a la lista.

3 Proporcione las claves de licencia válidas correspondientes para todos los instrumentos que aparecen en la lista.

   El software reconoce automáticamente qué licencia es válida para cada módulo.

4 Haga clic en **Next**.

   Se abre el cuadro de diálogo **ChemStation Administration Tool**.

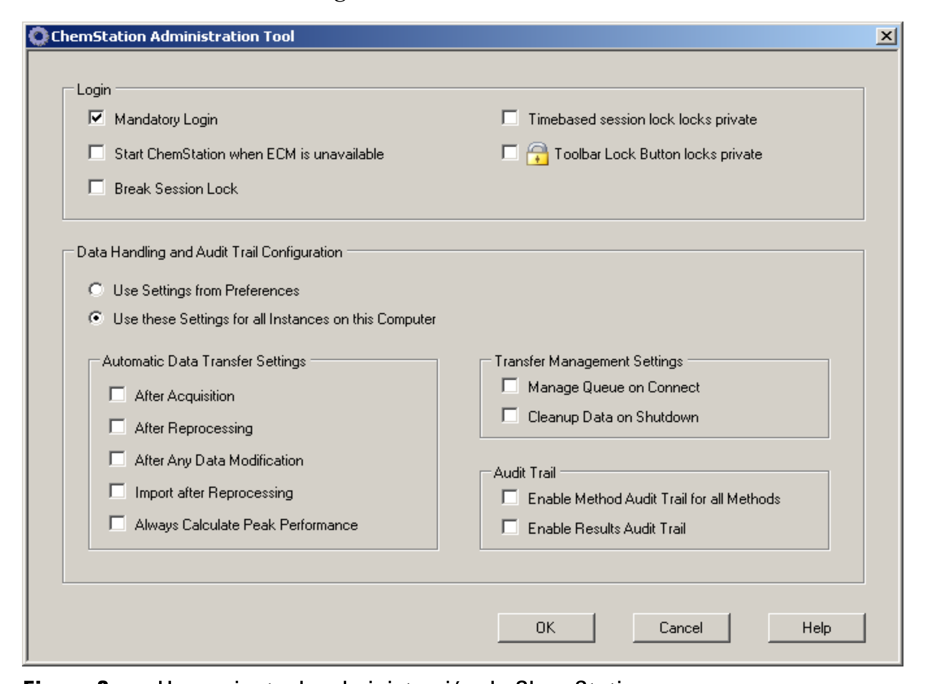


Figura 3 Herramienta de administración de ChemStation

5 Marque o desmarque la casilla de verificación **Mandatory Login**, dependiendo de si el inicio de sesión en ECM debe ser obligatorio u opcional en ChemStation (los parámetros se utilizarán para todas las instancias de ChemStation instaladas en ese ordenador). Para obtener más información sobre las funciones de inicio de sesión, consulte "Permisos de usuario" en la página 40.

NOTA Durante la instalación, no es necesario configurar el resto de opciones de este cuadro de diálogo. Estos elementos pueden configurarse en cualquier momento en ChemStation (consulte "Preferencias de ECM" en la página 46 y "Registro de auditorías y libros de registro" en la página 87) o utilizando directamente la herramienta de administración de ChemStation (consulte "Herramienta de administración de ChemStation" en la página 97).

6 Haga clic en **OK**.
7 Haga clic en **Finish**.

   Se abre el Editor de configuración.
8 Proceda ahora a configurar los instrumentos.

Para configurar los instrumentos

Puede configurar los instrumentos en el Editor de configuración. Para obtener más información, consulte el manual *Instalación de ChemStation*.

Una vez finalizada correctamente la instalación, ChemStation incluye el nuevo menú **ECM** y varios elementos de la interfase de ECM (consulte "Presentación de los nuevos elementos de la interfaz" en la página 43.

Incorporación de la opción ChemStation OpenLAB a una ChemStation existente

Para agregar la opción ChemStation OpenLAB posteriormente

1 En el menú Inicio de la barra de tareas, seleccione **Start > All Programs > Agilent ChemStation > Add instrument**.

   Se abrirá el cuadro de diálogo **Setup Wizard - Instruments** (consulte Figura 2 en la página 31).
2 En **General Addon products**, marque la casilla **ChemStation OpenLAB Option**.
3 Haga clic en **Next**.

Se abre el cuadro de diálogo **Setup Wizard - Licenses**.

4 Introduzca una clave de licencia válida para la opción ChemStation en el campo de entrada de la parte inferior.

5 Haga clic en **Add** para añadir una clave de licencia a la lista.

6 Haga clic en **Next**.

Se abre el cuadro de diálogo **ChemStation Administration Tool** (consulte Figura 3 en la página 32).

7 Marque o desmarque la casilla de verificación **Mandatory Login**, dependiendo de si el inicio de sesión en ECM debe ser obligatorio u opcional en todas las instancias de ChemStation de ese ordenador.

8 Haga clic en **OK**.

9 Haga clic en **Finish**.

Se abre el Editor de configuración. Si ya ha configurado los instrumentos y ha agregado la opción OpenLAB, puede salir del Editor de configuraciones sin realizar ninguna otra acción.

10 Prepare el cliente web de ECM e instale API de ECM tal como se describe en “Preparación del cliente web de ECM” en la página 29.

Permitir a los usuarios iniciar la herramienta de administración de ChemStation

La herramienta de administración de ChemStation se instala automáticamente como parte de la opción ChemStation OpenLAB durante el procedimiento descrito anteriormente.

Dicha herramienta de administración permite modificar con un solo paso la configuración de transferencia (consulte “Configuración de transferencia automática de datos” en la página 49) de todas las instancias de ChemStation de un ordenador. Además, dispone de varias funciones que resultan útiles en caso de pérdida de la conexión entre el cliente de ChemStation y el servidor ECM. Dado que una de esas funciones es cambiar el inicio de sesión obligatorio de ECM, el acceso a la herramienta de administración de ChemStation debe estar limitado de forma estricta.

Durante la instalación de la opción ChemStation OpenLAB, se crea automáticamente el grupo de usuarios locales **CSAdministrators**. Sólo los miembros de este grupo tienen permiso para ejecutar la herramienta de administración de

ChemStation. El usuario que instala ChemStation se agrega automáticamente al grupo **CSAdministrators**. De forma adicional, se concede al grupo de Windows **Administrators**, así como al usuario que instale ChemStation, privilegios de Control total en el archivo ejecutable de la herramienta de administración (Agilent.ChemStation.ECM.ECMAdmin.exe), por lo que podrán ejecutar la herramienta.

NOTA Para obtener más información sobre la herramienta de administración de ChemStation, consulte "Administración de los parámetros de ChemStation" en la página 97.

Para agregar un usuario de Windows al grupo CSAdministrators:

1 En el menú Inicio de la barra de tareas, seleccione **Start > Settings > Control Panel > Administrative Tools > Computer Management**.

Se abre la ventana **Computer Management**.

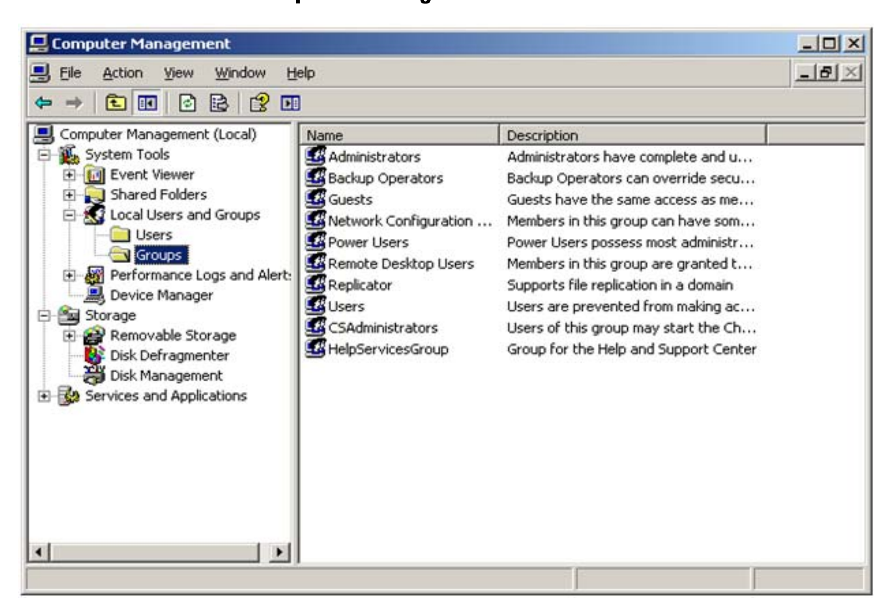
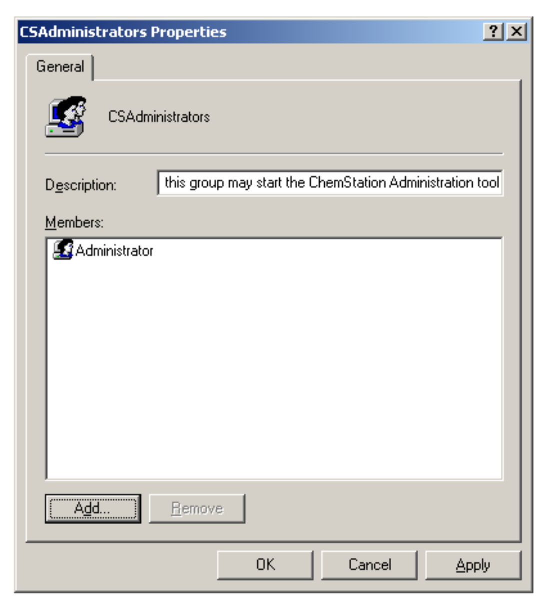


Figura 4 Ventana de Administración de equipos

2 Haga clic con el botón secundario del ratón en el grupo **CSAdministrator** y, en el menú contextual, seleccione **Add to Group...**.

El cuadro de diálogo **Properties** muestra los usuarios que pertenecen actualmente al grupo.



3 Utilice el botón **Add** para añadir los usuarios necesarios.

Después de confirmar con **OK**, el cuadro de diálogo **Properties** contendrá, además, los usuarios que se acaban de agregar.

Desinstalación

Para desinstalar Agilent ChemStation con Windows XP

1 En el menú Inicio de la barra de tareas, seleccione **Start > Settings > Control Panel > Add or Remove Programs**.

2 Seleccione el programa **Agilent ChemStation** y haga clic en **Remove**.

3 Cuando se le pida confirmación, haga clic en **Yes**.

Para desinstalar Agilent ChemStation con Windows Vista

1 En el menú Inicio de la barra de tareas, seleccione **Start > Control Panel > Programs > Programs and Features**.

2 Seleccione el programa **Agilent ChemStation** y haga clic en **Remove**.

3 Cuando se le pida confirmación, haga clic en **Yes**.

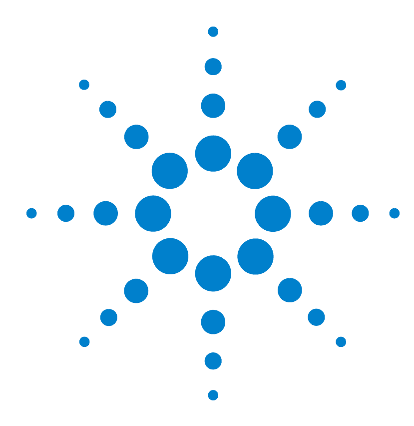
El programa se desinstala. Todos los archivos de la carpeta de ChemStation (por defecto: C:\chem32) se eliminan. Sólo se conservan los archivos modificados por el usuario (por ejemplo, métodos, plantillas de secuencias o archivos de datos).

Para desinstalar otros componentes de ChemStation

Durante la instalación de ChemStation, se instalan algunos componentes adicionales. Puede eliminar estos componentes mediante la función **Add or Remove Programs**, que también permite la desinstalación de ChemStation.

Es posible que con ChemStation se hayan instalado los siguientes componentes:

- PDF-XChange 4.0
- Microsoft .NET Framework 3.5 SP1



3
Conceptos básicos de la opción ChemStation OpenLAB

Permisos de usuario 40
- Inicio/cierre de sesión 40
- Operador de ChemStation y usuario de ECM 41
- Bloqueo de sesión 42

Interfase de usuario de la opción OpenLAB en ChemStation 43
- Presentación de los nuevos elementos de la interfaz 43
- El menú de ECM 44

Preferencias de ECM 46
- Ruta de datos remotos 47
- Configuración de transferencia automática de datos 49
- Configuración de administración de transferencias 51
- Administrador de cola del spooler 52

Ruta de datos remotos como secuencia de parámetros 56

Formatos de archivo comprimido de ChemStation 58

En este capítulo se describe cómo iniciar la sesión en ECM en ChemStation y se explican los elementos y barras de herramientas de la interfaz de usuario relacionados con ECM, así como los parámetros principales de las preferencias.

Permisos de usuario

Inicio/cierre de sesión

Para impedir accesos no autorizados a ECM o usos no autorizados de la opción ChemStation OpenLAB, ECM exige la autenticación mediante un nombre de usuario y una contraseña. Además, cada usuario debe tener privilegios de usuario asignados que definan el contenido al que se puede acceder.

La administración de usuarios se configura y administra desde el servidor de ECM. Para obtener más información sobre el inicio de sesión y la configuración de usuarios, consulte la Guía del usuario/administrador de ECM.

Opcional u obligatorio

En función de la configuración seleccionada durante la instalación de ChemStation, el inicio de sesión en ECM puede ser opcional u obligatorio. Si es obligatorio, habrá que iniciar la sesión en ECM durante el arranque de ChemStation. Si es opcional, se puede omitir inicialmente este paso e iniciar la sesión en ECM más tarde.

Si ya ha iniciado la sesión en el servidor de ECM en la sesión en línea del instrumento e inicia la sesión fuera de línea a través del elemento **Reprocessing Copy** en el menú **View**, se establecerá automáticamente la conexión del usuario con ECM con la misma información de inicio de sesión (inicio de sesión silencioso).

Si no está conectado a ECM, todas las funciones de ECM aparecerán atenuadas.

Es posible iniciar la sesión en ECM desde las siguientes vistas de ChemStation:

- Método y Control de análisis
- Análisis de datos

Una vez iniciada la sesión en ECM, se pueden cargar datos en ECM y, al mismo tiempo, trabajar en el sistema de archivos local de ChemStation.

El inicio de sesión depende de la sesión del instrumento; sólo puede conectarse un usuario a ECM cada vez. Si otro usuario desea iniciar sesión, usted deberá cerrar primero la sesión.

Credenciales de usuario

El cuadro de diálogo **Login** requiere la introducción de un conjunto de datos de autorización válidos para poder iniciar la sesión en ECM. La información de inicio de sesión es específica del servidor de ECM y la proporcionará el administrador de ECM.

Es necesario introducir los siguientes datos de inicio de sesión:

- **Server URL**: la URL del servidor de ECM
- **Account**: puede almacenar el contenido de las ubicaciones asignadas en la cuenta específica; un servidor de ECM puede tener varias cuentas.
- **Username:** el nombre de usuario definido en la cuenta de ECM o su nombre de usuario de dominio de NT (según la configuración de usuario de ECM)
- **Password**: la contraseña proporcionada por el administrador, que puede cambiarse a petición (para usuarios "integrados" en ECM) o la contraseña de su cuenta de dominio de NT si inicia la sesión con un nombre de usuario de dominio de NT.
- **Log on to**: el dominio que administra a los usuarios de ECM

Operador de ChemStation y usuario de ECM

Si inicia la sesión en ECM y posee autorización del sistema ECM, el nombre de operador de ChemStation de la información de muestra (cuando se analizan muestras individuales) o de los parámetros de secuencia (al analizar una secuencia) se sobrescribe con su nombre de usuario de ECM.

Mientras un usuario permanezca conectado a ECM, el nombre del operador viene dado por el inicio de sesión en ECM y no puede sobrescribirse. Al cerrar la sesión en ECM, se elimina el nombre de operador de ChemStation definido por ECM y se sustituye por la entrada “desconectado”. Mientras ECM está adquiriendo datos, no es posible iniciar ni cerrar la sesión de ECM. Esto evita que se modifique el nombre del operador durante la adquisición de datos.

Bloqueo de sesión

Si se abandona el ordenador de ChemStation durante un tiempo de terminado, se puede bloquear ChemStation para que ningún otro usuario pueda acceder al programa. Se trata de una función de seguridad que garantiza que no haya accesos no autorizados a ChemStation. Al activar el bloqueo de sesión, tanto usted como cualquier otro usuario deberán proporcionar un inicio de sesión válido en ECM antes de seguir trabajando con ChemStation.

Dispone de las siguientes opciones para activar el bloqueo de sesión:

- *En privado* (**ECM > Lock Session > privately**): sólo pueden iniciar sesión el usuario que activó el bloqueo de sesión o un usuario con privilegio de **CS: Break Session Lock**.
- *No en privado* (**ECM > Lock Session > non privately**): cualquier usuario válido de ECM puede iniciar sesión. Resulta útil, por ejemplo, ante un cambio de turno donde el personal que sale protege ChemStation hasta que el personal del nuevo turno comienza a trabajar.
- *Botón de bloqueo de la barra de herramientas*: el botón de bloqueo de la barra de herramientas puede configurarse de modo que bloquee la sesión de ChemStation tanto de forma privada como no privada (consulte las “Opciones de inicio de sesión” en la página 98).
- *En función del tiempo*: dependiendo de la configuración de la cuenta de ECM, ChemStation se bloquea automáticamente después de un determinado período de tiempo sin que haya ninguna interacción por parte del usuario (consulte **Inactivity Timeout** en “Administración en ECM” en la página 93). Si no hay actividad en un cliente web de ECM, éste también se bloquea pasado un tiempo determinado. ChemStation y el cliente web de ECM se bloquean de forma independiente entre sí.

  el botón de bloqueo de sesión en función del tiempo puede configurarse de modo que bloquee la sesión de ChemStation tanto de forma privada como no privada (consulte las “Opciones de inicio de sesión” en la página 98).

Interfase de usuario de la opción OpenLAB en ChemStation

Presentación de los nuevos elementos de la interfaz

Con la instalación de la opción ChemStation OpenLAB, estarán disponibles los siguientes menús y elementos nuevos de la interfaz:

Menú	Elementos nuevos	Descripción
Method	Comando nuevo • **Enable Audit Trail**	Consulte “Registro de auditoría de métodos” en la página 87
Secuencia > Parámetros de secuencia, pestaña **Sequence Parameters**	Campos nuevos en la pestaña **Sequence Parameters**: • **Remote Data Path**	Consulte “Ruta de datos remotos como secuencia de parámetros” en la página 56
Secuencia > Parámetros de secuencia, pestaña **Sequence Output**	Campos nuevos en la pestaña **Sequence Output**: • **OpenLAB Intelligence Reporter Template**	Consulte “Selección de plantilla en Resultado de secuencia” en la página 130
Report	Comando nuevo • **Report History**	Consulte “Historial de informes” en la página 89
Vista > Preferencias	Nuevas fichas del cuadro de diálogo Preferencias: • **Transfer Settings** • **Audit Trail**	Consulte “Preferencias de ECM” en la página 46 y “Registro de auditorías y libros de registro” en la página 87
ECM	Menú completamente nuevo	Consulte “El menú de ECM” en la página 44
Barra de herramientas (en función de la vista actual)	• Accesos directos a varios comandos del menú del **ECM** • Información de **LCDF**	• Información de LCDF en la vista **Data Analysis**: muestra la ruta de LCDF de un archivo almacenado en ECM. • Información de LCDF en la vista **Method and Run Control**: lista desplegable que muestra las últimas diez rutas de LCDF tal como se definieron en las preferencias, si está seleccionada la carga automática **After Acquisition**.

Menú	Elementos nuevos	Descripción
Información relativa al ECM en el **System Diagram** en la vista **Method and Run Control** (solamente en la interfaz de usuario clásica). ECM LCDF: WAD_Support\Lab C\LC\data2 Operator: MEYER,STEFAN (A-Germany,ex1) Automatic transfer after acquisition: yes Automatic transfer after reprocessing: yes Automatic transfer after any data modification: yes Automatic import after reprocessing: no Calculate peak performance: no	Vista de información completamente nueva	Hay disponible la siguiente información: • **LCDF** • **Operator** • **Automatic transfer after acquisition** • **Automatic transfer after reprocessing** • **Automatic transfer after any data modification** • **Automatic import after reprocessing** • **Calculate peak performance**

El menú de ECM

El menú de **ECM** y sus comandos dependen de la vista que esté activa en ese momento. Para obtener más información, consulte la tabla siguiente.

NOTA No hay menú de **ECM** en las vistas **Report Layout**, **Verification (OQ/PV)** o **Diagnosis**.

Comando	Descripción	Disponible en vistas de ChemStation
Comandos relacionados con el usuario: **Log In ...** **Log out** **Change User ...** **Lock Session**	Consulte "Permisos de usuario" en la página 40 y "Bloqueo de sesión" en la página 42.	• **Method and Run Control** • **Data Analysis**
Comandos de actualización: **Update Methods ...** **Update Sequences Templates ...**	Actualizan todos los métodos/plantillas de secuencias almacenados en el sistema de archivos local con la versión actual de ECM (si hubiera alguno en ECM). Los cambios locales se sobrescriben.	• **Method and Run Control**

Comando	Descripción	Disponible en vistas de ChemStation
Cleanup Data	El comando **Cleanup Data** también elimina todos los contenedores de datos o secuencias del sistema de archivos local de ECM. Antes de confirmar este comando, asegúrese de que ECM tiene cargada la última versión. Consulte “Limpiar datos al apagar” en la página 51.	• **Data Analysis**
Manage Queue	Con el comando **Manage Queue** se puede reanudar cualquier carga de datos interrumpida en ECM. Consulte “Administrar cola al conectar” en la página 51.	• **Method and Run Control** • **Data Analysis**
Preferences	Consulte “Preferencias de ECM” en la página 46 para obtener más información sobre el cuadro de diálogo **Preferences**.	• **Method and Run Control** • **Data Analysis**
Comandos relacionados con el método: **Load Method ...** **Save Method**	Consulte “Flujos de trabajo para métodos y plantillas de secuencias” en la página 73	• **Method and Run Control** • **Data Analysis**
Comandos relacionados con los datos: **Load Data ...** **Save Data** **Save Data As ...**	Consulte “Flujos de trabajo relacionados con los datos” en la página 61	• **Data Analysis**
Comandos relacionados con la plantilla de secuencias: **Load Sequence Template ...** **Save Sequence Template**	Consulte “Flujos de trabajo para métodos y plantillas de secuencias” en la página 73	• **Method and Run Control**
Comandos relacionados con el generador de informes de inteligencia de OpenLAB: **Start OpenLAB IR** **Create OpenLAB IR Report**	Consulte “Interfase de componentes relacionados con OpenLAB IR” en la página 130	• **Data Analysis**

Preferencias de ECM

El cuadro de diálogo **Preferences** contiene dos fichas importantes para la opción ChemStation OpenLAB: las fichas **Transfer Settings** y **Audit Trail**.

NOTA Es posible que se hayan especificado varios parámetros en las fichas **Transfer Settings** y **Audit Trail** para *todas* las instancias de ChemStation del ordenador a través de la herramienta de administración de ChemStation (consulte "Herramienta de administración de ChemStation" en la página 97). En este caso, no será posible modificar la configuración desde el cuadro de diálogo **Preferences**.

En la ficha **Transfer Settings**, debe especificar las siguientes preferencias para que los datos de ChemStation se almacenen automáticamente en ECM:

- Ruta de datos remotos
- Configuración de transferencia automática de datos
- Configuración de administración de transferencias

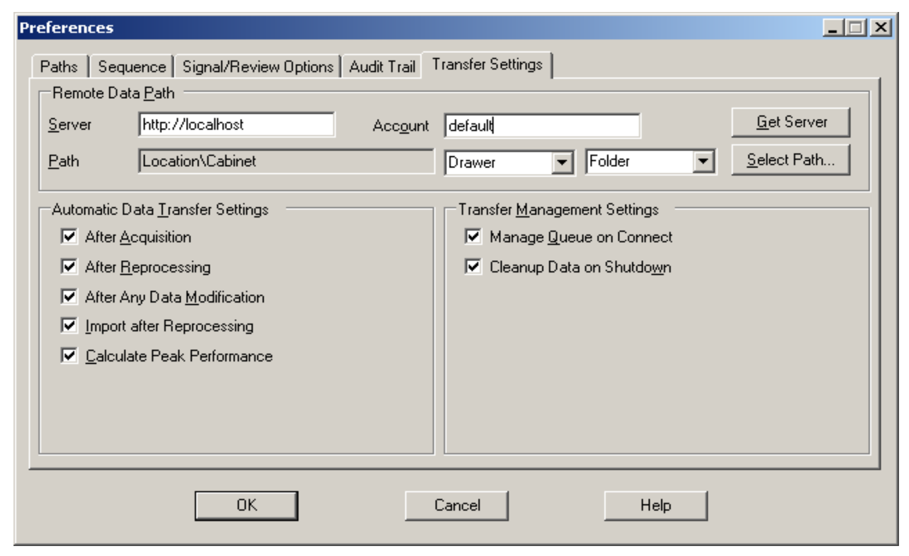


Figura 5 Ficha Configuración de transferencia del cuadro de diálogo Preferencias

Todos estos elementos se pueden especificar de forma independiente para cada instrumento. La sesiones en línea y fuera de línea se sincronizan automáticamente.

En la ficha **Audit Trail**, puede habilitarse el registro de auditoría de métodos y de resultados. Para obtener información detallada sobre los registros de auditoría, consulte “Registro de auditorías y libros de registro” en la página 87.

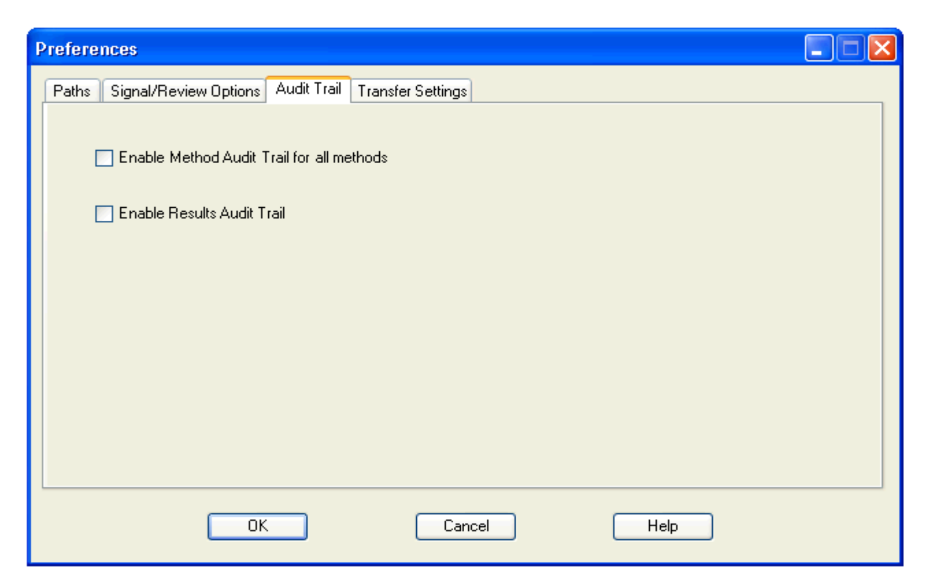


Figura 6 Ficha Registro de auditoría del cuadro de diálogo Preferencias

NOTA

Estos parámetros pueden modificarse mediante un único paso para todas las instancias de ChemStation del PC cliente ejecutando la herramienta de administración de ChemStation (consulte “Herramienta de administración de ChemStation” en la página 97).

Ruta de datos remotos

En la opción ChemStation OpenLAB, es necesario especificar la **Remote Data Path** para guardar los datos en la ubicación correcta de ECM.

En el cuadro de diálogo **Preferences**, la pestaña **Transfer Settings** (consulte Figura 6 en la página 47) permite definir la **Remote Data Path**. La **Remote Data Path** refleja la estructura de LCDF en ECM.

Servidor/cuenta

En los campos de texto **Server** y **Account**, se puede especificar el servidor de ECM y la cuenta de ECM que desea utilizar para almacenar los datos de ChemStation.

La primera vez que se inicie sesión en ECM desde ChemStation, es necesario especificar la información del servidor y de la cuenta. También se puede introducir manualmente la información o hacer clic en **Get Server** para rellenar los campos con el servidor y la cuenta a la que el usuario está conectado en ese momento. A continuación, ChemStation guardará la información del servidor y de la cuenta para sesiones futuras.

Si posteriormente se conecta a otro servidor de ECM, tendrá que actualizar la información del servidor y de la cuenta. Puede volver a hacer clic en **Get Server** para rellenar los campos con el nombre del servidor de ECM y la cuenta de ECM que están en uso en ese momento.

Ruta

Para especificar la ruta de datos remotos, es necesario seleccionar una Ubicación y un Archivador disponibles en el navegador de ECM. Haga clic en **Select Path** para elegir la ruta necesaria en un cuadro de diálogo de Explorador de ECM.

NOTA Si no hay ninguna **Remote Data Path** especificada, se mostrará un mensaje de advertencia durante el inicio de ChemStation.

Con respecto al Cajón y a la Carpeta, puede elegir mantener los elementos seleccionados o seleccionar señales predefinidas para crear una ruta automática. Al utilizar señales predefinidas en la ruta de datos remotos, el sistema crea automáticamente los elementos en el caso de que no existan en ECM.

NOTA Si utiliza señales, asegúrese de que dispone de los privilegios de ECM necesarios para crear carpetas. Como alternativa, otro usuario que disponga de los privilegios necesarios puede crear previamente las carpetas necesarias.

Alternativamente, la **Remote Data Path** también puede especificarse como **Sequence Parameter** (consulte “Ruta de datos remotos como secuencia de parámetros” en la página 56). Los objetos cargados sólo pueden almacenarse en el nivel de Carpeta.

Tabla 1 Elementos de ruta de datos remotos

Elemento de ruta de datos de ECM	Convención
Ubicación	Ubicación fija para seleccionar en ECM
Archivador	Archivador fijo para seleccionar en ECM
Cajón	Cajón disponible en ECM Señales: Nombre de instrumento, Número de instrumento, Operador
Carpeta	Carpeta disponible en ECM Señales: Nombre de instrumento, Número de instrumento, Operador

Configuración de transferencia automática de datos

En el cuadro de diálogo **Preferences** (**View > Preferences**), la ficha **ECM** permite especificar los parámetros automáticos para la transferencia de datos primarios. La configuración de transferencia, al igual que la ruta de datos remotos, se utiliza automáticamente para cargar datos en ECM.

NOTA Si no ha iniciado sesión en ECM en ChemStation, los datos no podrán cargarse automáticamente en ECM, tal como se especificó en la configuración de transferencia. Entonces los datos se pondrán en la cola del administrador de cola del spooler (consulte “Administrador de cola del spooler” en la página 52).

NOTA Si la adquisición de datos se realiza desde la vista **Diagnosis** o **OQ/PV**, se omitirá la configuración de transferencia. Los datos primarios analíticos se escriben en el sistema de archivos de datos de ChemStation tal como se predefinió en los métodos de diagnóstico o verificación.

Después de la adquisición

Si se marca esta casilla de verificación, los datos se cargan automáticamente en ECM después de una adquisición. Los archivos de datos primarios se escriben en el sistema de archivos local de ChemStation mientras la secuencia aún se está analizando. Una vez finalizada la secuencia completa, los archivos de datos primarios se comprimen en un archivo SSIZip que se carga después en ECM.

Para obtener más información, consulte “Flujo de trabajo 1: Adquisición y carga automática” en la página 61.

Después de una modificación de datos

Si marca esta casilla de verificación, el contenedor de datos de secuencia se carga automáticamente en ECM después de modificar los parámetros de análisis de datos de una muestra. Los datos se cargan incluso aunque no se vuelva a procesar la secuencia.

Para obtener más información, consulte "Flujo de trabajo 2: Revisión sin conexión durante una adquisición" en la página 64.

Después del reprocesamiento

Si marca esta casilla de verificación, el contenedor de datos de secuencia se carga automáticamente en ECM después de cada reprocesamiento de la secuencia.

Para obtener más información, consulte "Flujo de trabajo 3: Reprocesamiento de datos y carga automática" en la página 67.

Importación después del reprocesamiento

Si marca esta casilla de verificación, se carga en ECM una secuencia que sólo se almacena localmente después del reprocesamiento.

Para obtener más información, consulte "Flujo de trabajo 4: Importación después del reprocesamiento" en la página 71.

Calcular el rendimiento del pico

Esta opción afecta a la cantidad de datos transferidos. Si se selecciona esta opción, los valores de rendimiento ampliados (como, por ejemplo, *ruido* o *idoneidad del sistema*) siempre se calculan, se guardan en ECM y pueden utilizarse en el generador de informes de inteligencia de OpenLAB. Si desactiva la casilla de verificación, los valores de rendimiento ampliados sólo estarán disponibles si se seleccionan los estilos de informe de ChemStation **Performance** o **Extended Performance**.

Para obtener más información, consulte "Cálculo de valores de rendimiento" en la página 132.

Configuración de administración de transferencias

Administrar cola al conectar

Si, por cualquier motivo, se interrumpe la conexión con ECM, es posible que se interrumpan las cargas de datos en curso. En este caso, los datos restantes se escriben en una cola interna.

Cuando se marca la casilla de verificación **Manage Queue on Connect**, cada vez que se establece una conexión con ECM (es decir, cada vez que un usuario inicia la sesión en ECM desde ChemStation), ChemStation intenta cargar los datos restantes en ECM.

Como alternativa, puede abrir el cuadro de diálogo **Spooler Queue Manager** (consulte "Administrador de cola del spooler" en la página 52) en cualquier momento con el comando **ECM > Manage Queue** de la vista **Data Analysis**.

Limpiar datos al apagar

Si se selecciona esta casilla de verificación, ChemStation comprueba el sistema de archivos local cada vez que se apaga. Elimina todos los datos locales y archivos de secuencias que sabe que también están almacenados en ECM. Los métodos y las plantillas de secuencias permanecen en el sistema de archivos local.

NOTA Si marca la casilla de verificación **Cleanup Data on Shutdown**, deberá seleccionar también la Configuración de transferencia automática de datos **After Acquisition**, **After Reprocessing** y **After Any Data Modification**. De no hacerlo, si los usuarios olvidan cargar los datos en ECM antes de cerrar ChemStation, los datos podrían perderse.

NOTA Cuando el sistema deba cumplir la norma 21 CFR, Parte 11, tenga en cuenta que debe marcarse la casilla de verificación **Cleanup Data on Shutdown**. El uso de esta función previene el acceso no autorizado a los archivos de datos locales.

Como alternativa, se puede abrir en cualquier momento el cuadro de diálogo **Data Cleanup** con el comando **ECM > Limpiar datos** de la vista **Data Analysis**.

El cuadro de diálogo presenta todos los conjuntos de datos relativos al ECM aparte de los datos cargados en ese momento. Hay disponibles las siguientes columnas:

- **Directory**: Ubicación del archivo local

- **ECM Information**: Servidor de ECM, información de cuenta y ruta de LCDF del archivo en ECM
- **Last Modified**: Fecha/hora en que se cambió por última vez la copia en ECM
- **Locally Modified**: informa sobre si la copia local se ha modificado
- **Local Version**: versión descargada al directorio local

Ahora puede seleccionar manualmente los conjuntos de datos que se van a borrar del disco local.

Como alternativa, mediante una lista desplegable, puede anular la selección de todos los conjuntos de datos, seleccionarlos todos, seleccionar solamente un único análisis, seleccionar solamente contenedores de secuencias, seleccionar elementos anteriores al día de hoy o elementos con más de una semana de antigüedad.

Después de pulsar **OK**, se borran las copias locales de los conjuntos de datos seleccionados.

La limpieza de datos al apagar y la limpieza manual solamente son posibles si se cumplen la siguientes condiciones:

- que el usuario de la ChemStation esté conectado a ECM
- que no haya en curso más ejecuciones del instrumento ChemStation
- que la cola del spooler esté vacía

Si no se cumple cualquiera de estas condiciones, no se realizará la limpieza automática y no será posible abrir el cuadro de diálogo **Data Cleanup**.

Administrador de cola del spooler

El cuadro de diálogo **Spooler Queue Manager** se abre a través de **ECM > Manage Queue**. Si marcó la casilla de verificación **Manage Queue on Connect** y hay transferencias interrumpidas, el cuadro de diálogo también se abrirá al iniciar ChemStation.

Con este cuadro de diálogo se pueden administrar las transferencias de datos entre ChemStation y ECM interrumpidas o que no pudieron iniciarse por algún motivo. Cada trabajo de transferencia fallido se enumera en una línea independiente.

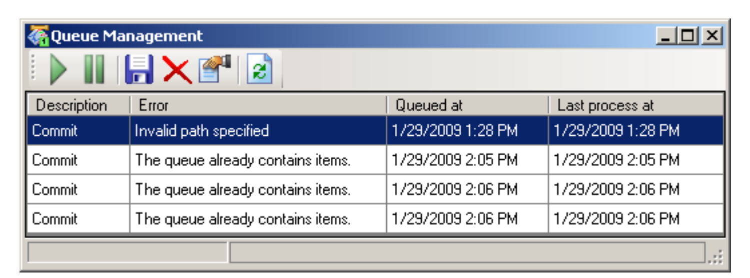


Figura 7 Administrador de cola del spooler

En cada línea se incluye la siguiente información:

- **Description**: Información sobre la versión de los datos que se van a transferir. Hay dos valores posibles:
  - **Import**: en este momento, en ECM no hay ninguna versión anterior de los datos. Los datos se han creado recientemente y se cargarán como Versión 1.
  - **Commit**: ya existe por lo menos una versión de los datos en ECM. El número de versión de los datos cargados aumentará en uno.
- **Error**: error que interrumpió la transferencia de datos. Para obtener más información sobre los posibles errores, consulte “Mensajes de error en el administrador de cola del spooler” en la página 152.
- **Queued at**: fecha en la que la transferencia fallida se puso en cola en el administrador de cola del spooler.
- **Processed last at**: fecha en la que se intentó la transferencia por última vez.

La barra de herramientas incorpora los siguientes comandos para administrar la cola:

Tabla 2 Barra de herramientas de administración de la cola

Icono	Explicación de la herramienta	Descripción
	Procesar cola	Prosigue con el procesamiento de los trabajos de transferencia. Mientras no se produzca ningún error, todos los trabajos de transferencia pendientes se procesarán en el orden en el que aparecen en la lista. Esta función sólo esta activa si se selecciona la primera línea de la lista.
	Detener procesamiento	Detiene el procesamiento de los trabajos de transferencia.

Tabla 2 Barra de herramientas de administración de la cola

Icono	Explicación de la herramienta	Descripción
	Guardar elemento seleccionado localmente	Guarda las líneas seleccionadas en un archivo. Sólo se guardan en el archivo la descripción, las fechas y el error mostrados. No se incluyen los datos respectivos.
	Eliminar elemento seleccionado	Elimina de la cola el trabajo de transferencia seleccionado. No se transferirán a ECM los datos afectados.
	Propiedades	Muestra el cuadro de diálogo **Queue Management**, en el que se muestran la información detallada de los elementos de la cola, o bien de forma resumida o detallada.
	Actualizar vista	Actualiza la visualización de los elementos de la lista.

Cuando se seleccionen elementos de la cola o se guarden en el disco local, se añadirá una entrada de registro de auditoría al registro de auditoría de ECM.

NOTA Cuando se borran elementos de la cola o se guardan en el disco local, todavía no se han cargado en ECM.

Cuadro de diálogo de Queue Management Details

El cuadro de diálogo **Queue Management Details** aparece al hacer clic en la herramienta que hay en la barra de herramientas del cuadro de diálogo **Queue Management**. Muestra datos específicos de los comandos del cuadro de diálogo **Queue Management**. Las pestañas de **Queue Management Details** ofrecen dos vistas de datos de comandos:

- Pestaña de resumen
- Pestaña de datos

En cualquiera de las dos pestañas, las herramientas de la barra de herramientas les permiten navegar por los datos de comandos:

	Muestra los datos del primer comando en la lista.
	Muestra los datos del comando anterior en la lista.
	Muestra los datos del siguiente comando en la lista.
	Muestra los datos del último comando en la lista.

Pestaña Summary

La pestaña **Summary** le ofrece la siguiente información resumida sobre el elemento seleccionado:

Command Description	Descripción del elemento.
Created	La fecha y la hora en que se añadió el elemento a la cola.
Changed	La fecha y la hora en que el elemento se procesó por última vez.
Last Error	Una descripción del error que ha provocado que el elemento se añada a la cola.

Pestaña Details

La pestaña **Details** le ofrece información detallada sobre el elemento seleccionado. No puede editar la información contenida en esta lista. La barra de herramienta le ofrece las herramientas siguientes:

	Ordena las propiedades por categoría.
	Ordena las propiedades alfanuméricamente.
	Esta herramienta está desactivada bajo cualquier circunstancia en la ChemStation.

Ruta de datos remotos como secuencia de parámetros

En lugar de especificar la **Remote Data Path** en las **Preferences** para todas las secuencias de adquisición que hay que procesar (consulte "Ruta de datos remotos" en la página 47), también se puede establecer directamente la ruta de datos remotos en la plantilla de secuencia. Esto permite configurar diferentes rutas remotas para cada secuencia sin tener que modificar la preferencias. La **Remote Data Path** para una plantilla de secuencia se configura en la pestaña **Sequence Parameters**.

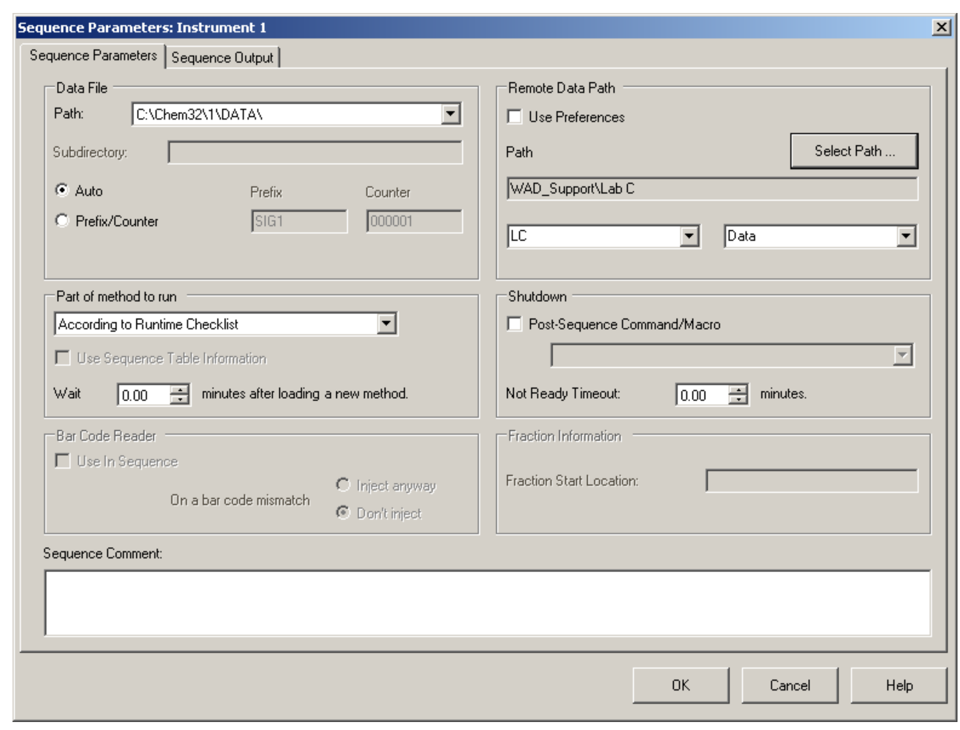


Figura 8 Pestaña **Sequence Parameters** del cuadro de diálogo **Sequence Parameters**

Use Preferences: cuando esta casilla está marcada, se utilizará la **Remote Data Path** tal como aparece especificada en las **Preferences**. Cualquier ruta LCDF especificada en los **Sequence Parameters** se ignorará para esta secuencia. Cuando esta casilla no esté marcada, se utilizará la **Remote Data Path** tal como se haya especificada al utilizar la plantilla de secuencia para adquirir datos.

Path: Para especificar la **Remote Data Path**, es necesario seleccionar una Ubicación y un Archivador disponibles en el navegador de ECM. Haga clic en **Select Path** para elegir la ruta necesaria en un cuadro de diálogo de Explorador de ECM. Con respecto al Cajón y a la Carpeta, puede elegir mantener los elementos seleccionados o seleccionar señales predefinidas para crear una ruta automática. Al utilizar señales predefinidas en la **Remote Data Path**, el sistema crea automáticamente los elementos en el caso de que no existan en ECM.

NOTA

Si utiliza señales, asegúrese de que dispone de los privilegios de ECM necesarios para crear carpetas. Como alternativa, otro usuario que disponga de los privilegios necesarios puede crear previamente las carpetas necesarias.

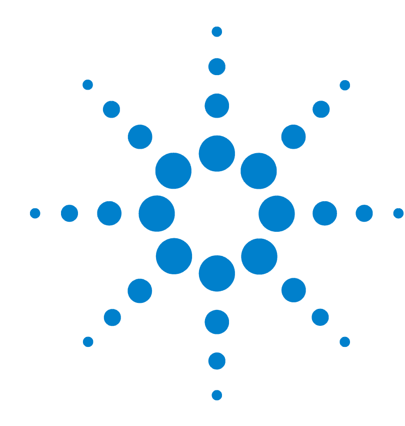
Formatos de archivo comprimido de ChemStation

Al cargar los datos de ChemStation en ECM, estos se comprimen automáticamente en un archivo SSIzip. Se utilizan diferentes formatos de compresión en función del tipo de datos.

Datos de ChemStation	Formato de compresión	Icono en ChemStation
Análisis individuales (archivo *.d ACQ.m y DA.M)	*.D.SSIZIP	
Contenedor de secuencias El contenedor de secuencias contiene recursivamente los datos de una secuencia completa almacenados en el subdirectorio de secuencias: • todos los archivos *.d, además de los ACQ.m y DA.M • todos los métodos *.m utilizados durante la adquisición • archivo de lote *.b • archivo de registro de secuencia *.log	*.SC.SSIZIP	
Métodos	*.M.SSIZIP	
Plantillas de secuencias	*.S o *.S.SSIZIP	

La compresión de los elementos de ChemStation forma parte de la opción ChemStation OpenLAB y no puede modificarse manualmente.

Dicha compresión se realiza automáticamente al cargar los datos en ECM. Al descargar los archivos SSZIP de ECM a ChemStation, estos se descomprimen automáticamente en el directorio correspondiente del ChemStation Explorer.



4 Trabajar con la opción ChemStation OpenLAB

Transferencia de datos a o desde ECM 60

Flujos de trabajo relacionados con los datos 61

- Flujo de trabajo 1: Adquisición y carga automática 61
- Flujo de trabajo 2: Revisión sin conexión durante una adquisición 64
- Flujo de trabajo 3: Reprocesamiento de datos y carga automática 67
- Flujo de trabajo 4: Importación después del reprocesamiento 71

Flujos de trabajo para métodos y plantillas de secuencias 73

- Flujo de trabajo 1: Archivos locales – Guardar nuevo método 73
- Flujo de trabajo 2: ECM – Guardar método modificado 75
- Actualización de la plantilla de secuencia o del método maestros locales 79

En este capítulo se describen los flujos de trabajo básicos con la opción ChemStation OpenLAB. Hay cuatro flujos de trabajo relacionados con los datos y dos para los métodos y plantillas de secuencias.

Transferencia de datos a o desde ECM

La opción ChemStation OpenLAB ofrece la capacidad de abrir y guardar los diferentes elementos de ChemStation en sus contextos de ChemStation:

- Métodos
- Plantillas de secuencias
- Datos de análisis individuales
- Datos de secuencia

Todos estos datos se guardan en ECM como contenedores SSIZIP (consulte “Formatos de archivo comprimido de ChemStation” en la página 58).

Al cargar los datos en ECM, el sistema de archivos de ChemStation sigue conservando copias locales de los archivos. Si se carga un elemento en ChemStation desde ECM, éste se carga automáticamente en su ubicación original.

Hay varias opciones disponibles relativas a la carga automática de datos de análisis/secuencia individual en ECM. Sin embargo, la restauración de datos almacenados en ChemStation desde ECM siempre precisa una acción de carga manual. Los métodos y las plantillas de secuencias siempre precisan una carga manual en ECM, así como una actualización o carga manual en ChemStation.

Para descargar datos desde ECM, existen varios comandos de **load** en el menú del **ECM**. Dependiendo de la vista actual, pueden cargarse diferentes archivos desde ECM. En la vista **Data Analysis**, es posible cargar datos de análisis o secuencias individuales. Estos datos se marcan automáticamente en ECM con el estado de **checked out**. En la vista **Method and Run Control**, pueden cargarse métodos y plantillas de secuencias. Estos elementos sólo se recuperan, no se verifican.

Los siguientes flujos de trabajo son ejemplos que representan tareas típicas realizadas con la opción ChemStation OpenLAB.

Flujos de trabajo relacionados con los datos

Flujo de trabajo 1: Adquisición y carga automática

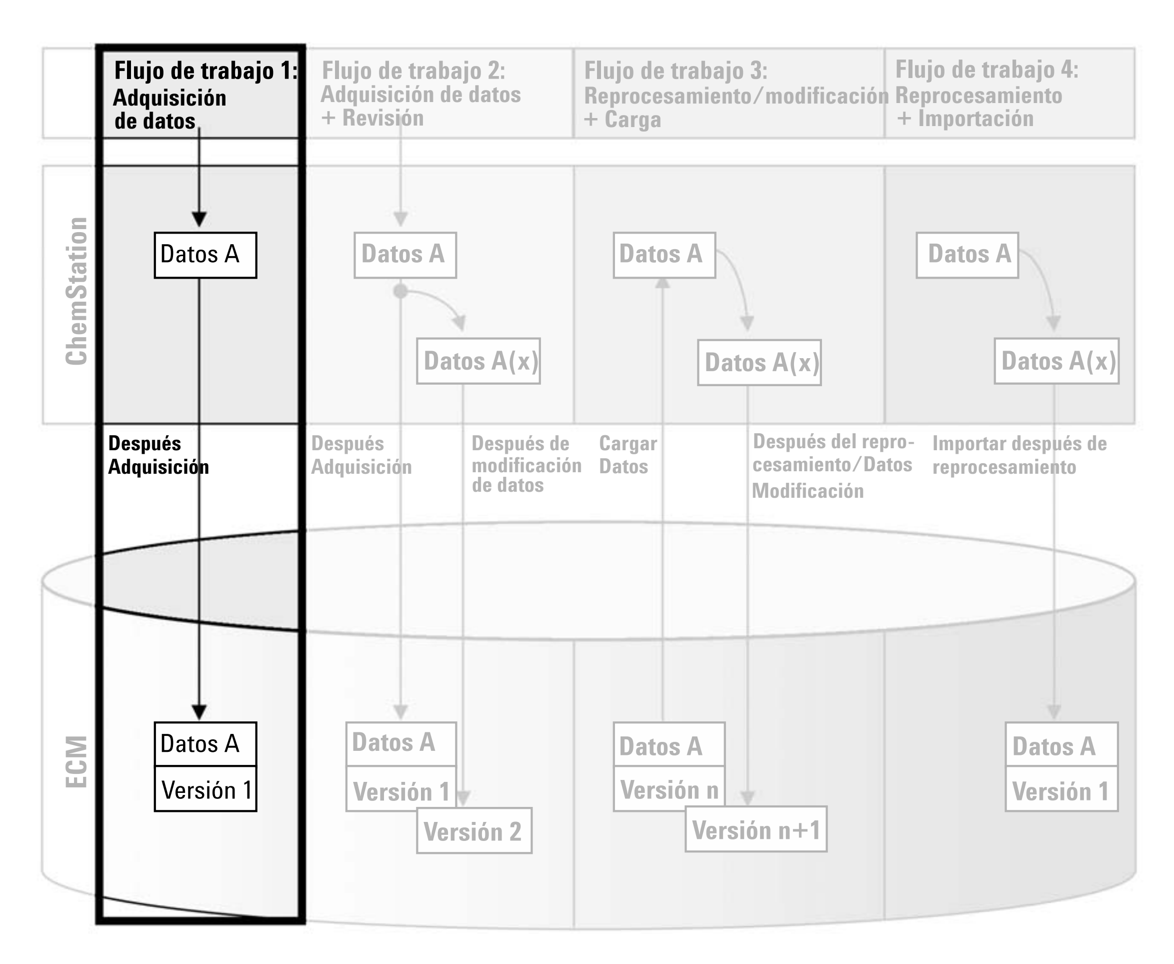


Figura 9 Adquisición y carga automática

El flujo de trabajo *Adquisición y carga automática*, consulte Figura 9 en la página 61, ilustra la forma en la que se cargan directamente los datos primarios en ECM una vez finalizada la adquisición. Inicialmente, los datos primarios se almacenan de forma local. Una vez finalizada la adquisición, los datos se cargan automáticamente en ECM.

Para guardar automáticamente los datos en ECM una vez finalizado un análisis o secuencia individual:

1 Inicie la sesión en ECM de una ChemStation en línea.

2 Cargue una plantilla de secuencia.

El nombre de usuario de ECM se introduce automáticamente en la plantilla de secuencia como el nombre del operador.

3 En la vista **Data Analysis**, haga clic en **View > Preferences**.

4 En la ficha **Transfer Settings**, configure los siguientes parámetros:

- **Remote Data Path**: seleccione la ubicación de ECM que desee utilizar para la carga de datos de secuencia.
- Seleccione la casilla de verificación **After Acquisition**.

5 Configure los parámetros y la tabla de la secuencia.

6 Inicie la adquisición.

Mientras se está ejecutando la adquisición, los datos primarios, la definición del método y una copia de la plantilla de secuencia se almacenan localmente en el ordenador de ChemStation.

Una vez finalizada la secuencia, todos los datos se cargan automáticamente en ECM como archivo *.SC.SSIZIP* para la ruta LCDF definida anteriormente. La copia local de los datos se mantiene en el ordenador de ChemStation. El nombre de archivo del contenedor de secuencias está determinado por la configuración de la plantilla de secuencia (para obtener más información sobre la configuración de la plantilla de secuencia, consulte el manual *Familiarización con ChemStation*). Después de cargar el contenedor de secuencias, el icono de secuencia del panel de navegación de ChemStation cambia de a . La barra de herramientas de ChemStation muestra la ruta LCDF del contenedor de secuencias.

NOTA El color del icono **Sequence Data** en el panel de navegación permite hacer seguimiento del estado de modificación de los datos:

: el contenedor de secuencias está guardado en ECM y no se ha modificado localmente

: el contenedor de secuencias está guardado en ECM y se ha modificado localmente

NOTA El proceso de carga puede durar un cierto tiempo cuando se cargan grandes cantidades de datos. Mientras tanto el usuario no puede realizar tareas en ChemStation, pues esta está ocupada. Espere por favor a que la carga haya finalizado.

Flujo de trabajo 2: Revisión sin conexión durante una adquisición

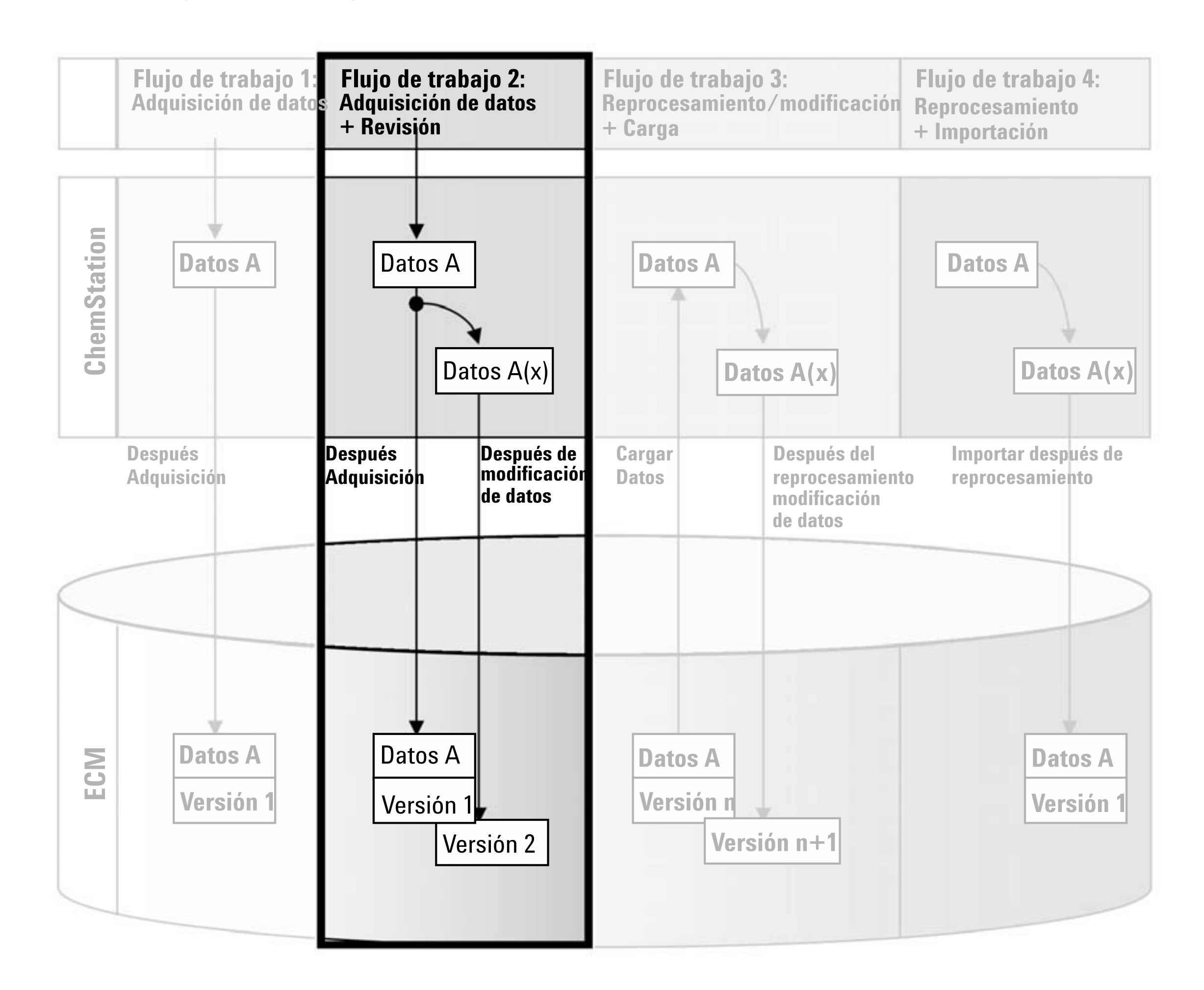


Figura 10 Revisión sin conexión durante una adquisición

El flujo de trabajo *Revisión sin conexión durante una adquisición*, consulte Figura 10 en la página 64, ilustra la forma en la que se revisan los datos primarios mientras la adquisición aún se encuentra en curso. Inmediatamente después de finalizar la adquisición, los datos primarios originales se cargan de

forma automática en ECM. Tras la revisión, los datos modificados se vuelven a cargar en ECM. Cuando los datos se cargan por segunda vez, se crea una nueva versión.

Para guardar automáticamente los datos en ECM después de modificarlos:

1 Inicie la sesión en ECM de una ChemStation en línea.

2 Cargue una plantilla de secuencia.

   El nombre de usuario de ECM se introduce automáticamente en la plantilla de secuencia como el nombre del operador.

3 En la vista **Data Analysis**, haga clic en **View > Preferences**.

4 En la ficha **Transfer Settings**, configure los siguientes parámetros:

   - **Remote Data Path**: seleccione la ubicación de ECM que desee utilizar para la carga de datos de secuencia.
   - Marque la casilla de verificación **After Acquisition**.
   - Marque la casilla de verificación **After Any Data Modification**.

5 Inicie la adquisición.

   Mientras se está ejecutando la adquisición, los datos primarios, la definición del método y una copia de la plantilla de secuencia se almacenan localmente en el ordenador de ChemStation.

6 Abra una instancia de ChemStation sin conexión y modifique algunos parámetros de análisis de datos para una de las muestras que ya hayan finalizado. Guarde localmente los cambios.

7 Una vez finalizada la adquisición, pueden suceder dos cosas:

   - Los datos primarios originales se cargan automáticamente en ECM en forma de archivo *.SC.SSIZIP*, *Versión 1* en la ubicación LCDF definida anteriormente. La LCDF de la nueva secuencia se muestra en la barra de herramientas de la ChemStation en línea.

     El nombre de archivo del contenedor de secuencias se determina según la configuración de la plantilla de secuencia (para obtener más información sobre la configuración de la plantilla de secuencia, consulte el manual *Familiarización con ChemStation*.

     El icono de secuencia del panel de navegación de ChemStation cambia de a .

- Se abre el cuadro de diálogo **ECM forced upload** en la ChemStation en línea. Haga clic en **OK** para confirmar que ha finalizado todos los trabajos en la instancia sin conexión. Tan pronto como confirme este cuadro de diálogo, los datos modificados se cargan en ECM como *Versión 2*.

  Una copia local de los datos modificados permanece en el ordenador de ChemStation.

NOTA Para ambas versiones (la versión después de la adquisición y la versión de la revisión paralela fuera de línea), el operador de ECM es el usuario que ha ejecutado la adquisición, incluso aunque sea otro usuario el que haya realizado la revisión en la ChemStation fuera de línea.

Flujo de trabajo 3: Reprocesamiento de datos y carga automática

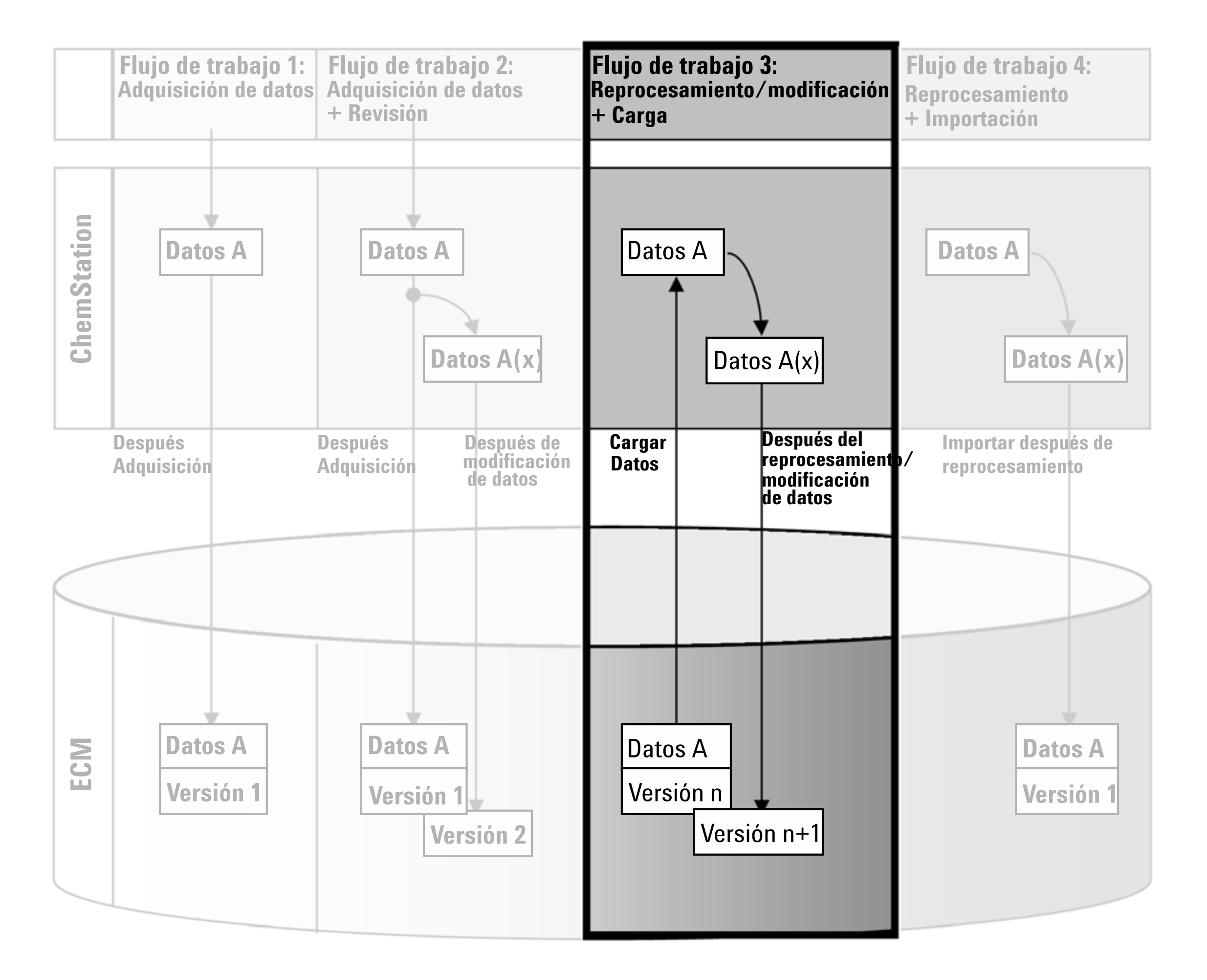


Figura 11 Reprocesamiento de datos y carga automática

El flujo de trabajo *Reprocesamiento de datos y carga automática*, consulte Figura 11 en la página 67, ilustra la forma en la que se reprocesan los datos y después se cargan automáticamente. Este flujo de trabajo se aplica a los datos almacenados previamente en ECM. Se crea en ECM una nueva versión de los datos para los datos reprocesados o modificados.

Para guardar automáticamente los datos en ECM después del reprocesamiento:

1 Inicie la sesión en ECM de ChemStation (en línea o sin conexión).

2 Seleccione **ECM > Load Data** para descargar una secuencia desde ECM.

Se abre el cuadro de diálogo **ECM Desktop Open**. Desplácese a la carpeta de ECM para guardar los datos que desee y seleccione uno de los siguientes archivos comprimidos:

- Datos de análisis individuales: archivos **.D.SSIZIP*
- datos de secuencias: archivos **.SC.SSIZIP*

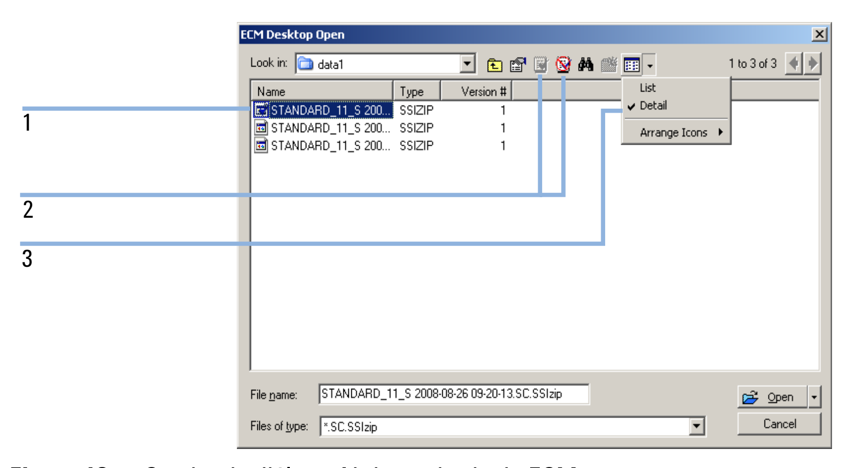


Figura 12 Cuadro de diálogo Abrir escritorio de ECM

Si el elemento está verificado, tendrá una marca con un icono azul o rojo (consulte el marcador 1):

(icono azul): usted (el usuario actual) ha verificado el elemento

(icono rojo): otro usuario de ECM ha verificado el elemento

Se puede cargar cualquier elemento que esté verificado. Sin embargo, si un elemento ha sido verificado por otro usuario de ECM, éste deberá registrar el elemento antes de que usted pueda volver a guardarlo en ECM.

Para verificar o registrar un elemento, use los iconos respectivos disponibles en el cuadro de diálogo **ECM Desktop Open** (consulte el marcador 2). Sólo es posible verificar la última versión de un elemento.

Para obtener más información sobre el tipo y la versión de los elementos disponibles, seleccione la vista **Detail** (consulte Figura 12 en la página 68, marcador 3). Para abrir una versión anterior de un elemento, seleccione el comando **Open Revisions** en el menú **Open** (consulte Figura 13 en la página 69). Con ello se abrirá el cuadro de diálogo **File Versions**, donde se enumeran todas las versiones disponibles del elemento (consulte Figura 14 en la página 69).

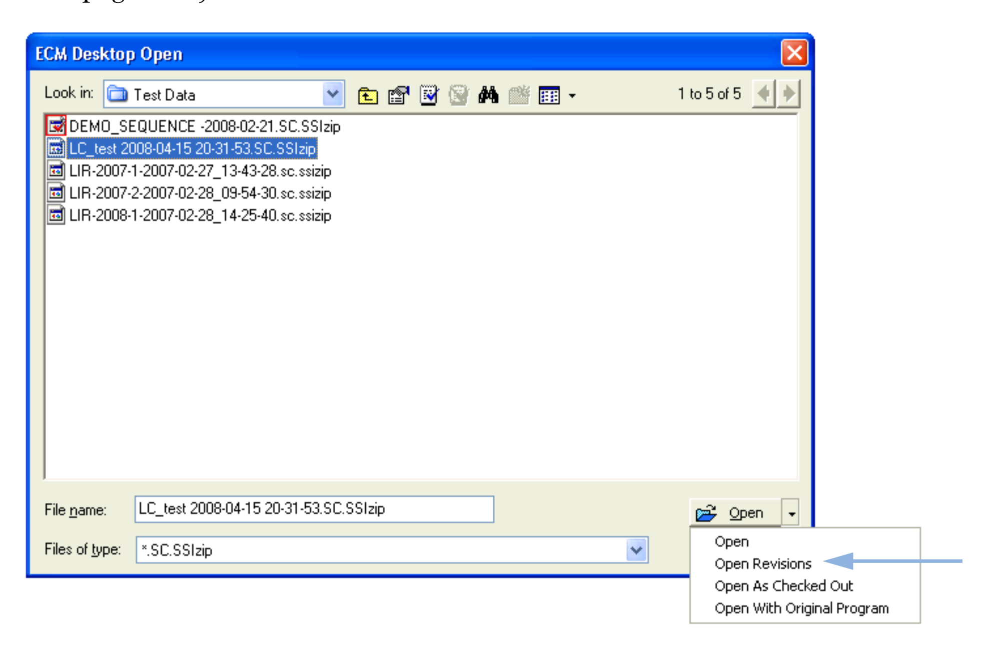


Figura 13 Comando Abrir revisiones

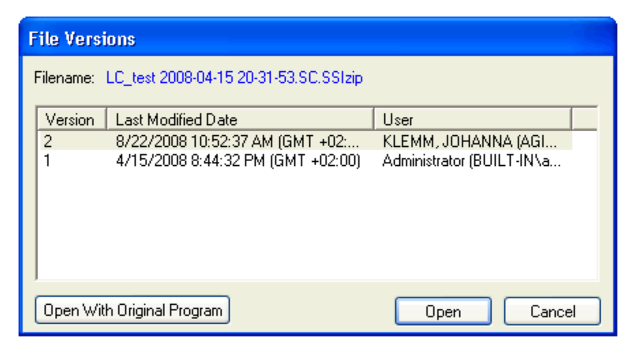


Figura 14 Cuadro de diálogo Versiones de archivo

3 Seleccione **Open** en cualquier cuadro de diálogo para descargar el elemento a ChemStation.

   Si el elemento todavía no se ha verificado, ECM lo verifica automáticamente al cargarlo en ChemStation.

   La barra de herramientas de ChemStation muestra la ruta LCDF de los datos.

4 En la vista **Data Analysis**, haga clic en **View > Preferences**.

5 En la ficha **Transfer Settings**, configure los siguientes parámetros:

   - Marque la casilla de verificación **After Reprocessing**.
   - Marque la casilla de verificación **After Any Data Modification**.

6 Modifique o reprocese los datos de secuencia.

   Una vez finalizado el reprocesamiento, los datos de secuencia se cargan con su nombre original en la ruta LCDF primaria El número de versión aumenta en uno.

   La copia local de los datos reprocesados se mantiene en el sistema de archivos local del ordenador de ChemStation.

Flujo de trabajo 4: Importación después del reprocesamiento

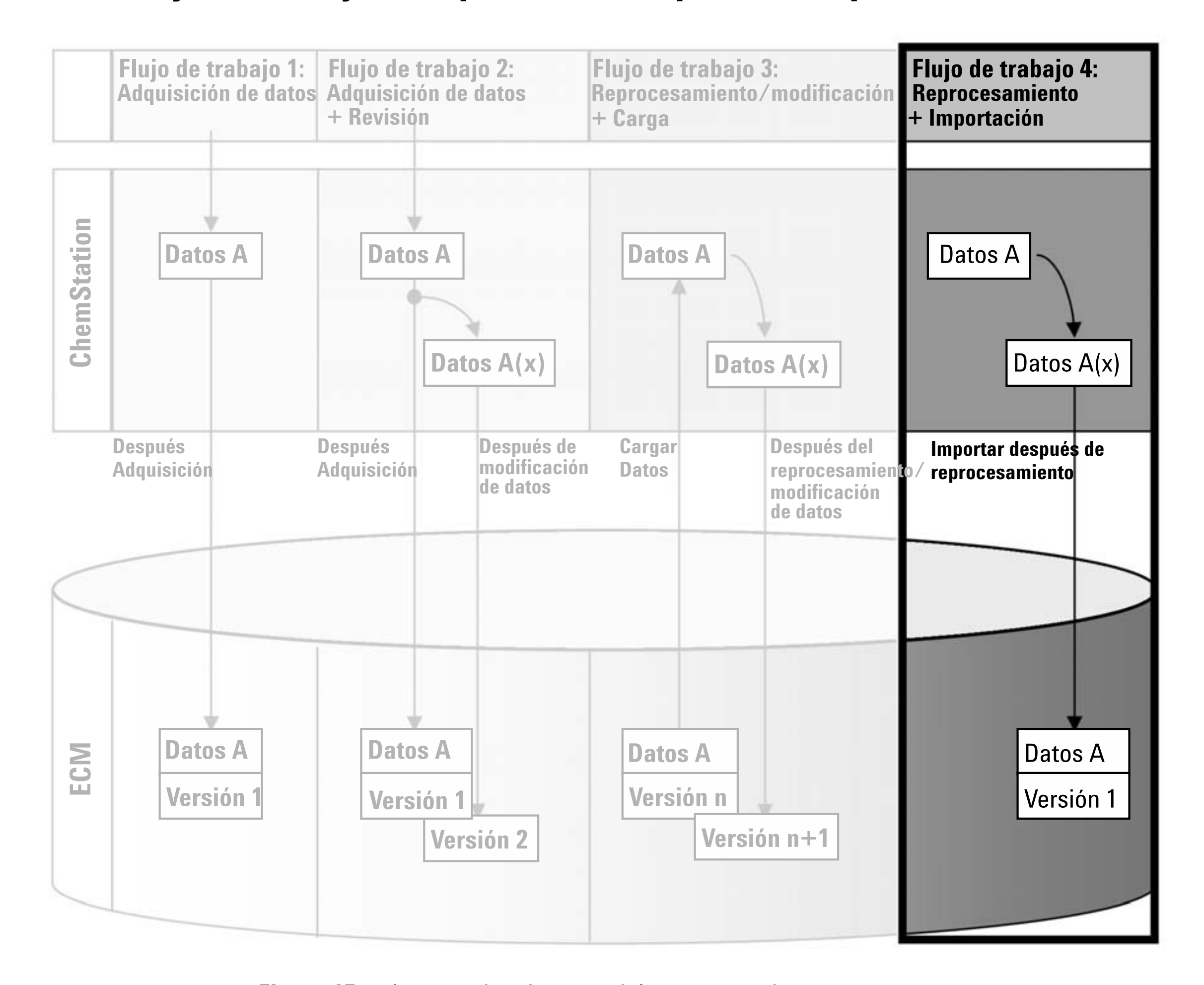


Figura 15 Importación después del reprocesamiento

El flujo de trabajo *Importación después del reprocesamiento*, consulte Figura 15 en la página 71, muestra la forma en que los datos guardados de forma local se reprocesan e importan automáticamente después en ECM.

Para guardar automáticamente los datos en ECM después del reprocesamiento:

1 Inicie la sesión en ECM de una ChemStation sin conexión.
2 Desde el sistema de archivos local, abra un secuencia que no haya guardado nunca en ECM.
3 En la vista **Data Analysis**, haga clic en **View > Preferences**.
4 En la ficha **Transfer Settings**, configure los siguientes parámetros:
   - **Remote Data Path**: seleccione la ubicación de ECM que desee utilizar para la carga de datos de secuencia.
   - Marque la casilla de verificación **Import after Reprocessing**.
5 Reprocese los datos de secuencia.

NOTA Los datos no se cargarán si sólo los modifica. Es necesario reprocesar los datos de secuencia.

Los datos de secuencia se cargan como un archivo *.SC.SSIZIP* nuevo, versión 1, en la ruta LCDF de ECM definida anteriormente. El nombre de archivo del contenedor de secuencias está determinado por la configuración de la plantilla de secuencia (para obtener más información sobre la configuración de la plantilla de secuencia, consulte el manual *Familiarización con ChemStation*.

El icono de secuencia del panel de navegación de ChemStation cambia de  a .

La copia local de los datos reprocesados se mantiene en el sistema de archivos local del ordenador de ChemStation.

Flujos de trabajo para métodos y plantillas de secuencias

Flujo de trabajo 1: Archivos locales – Guardar nuevo método

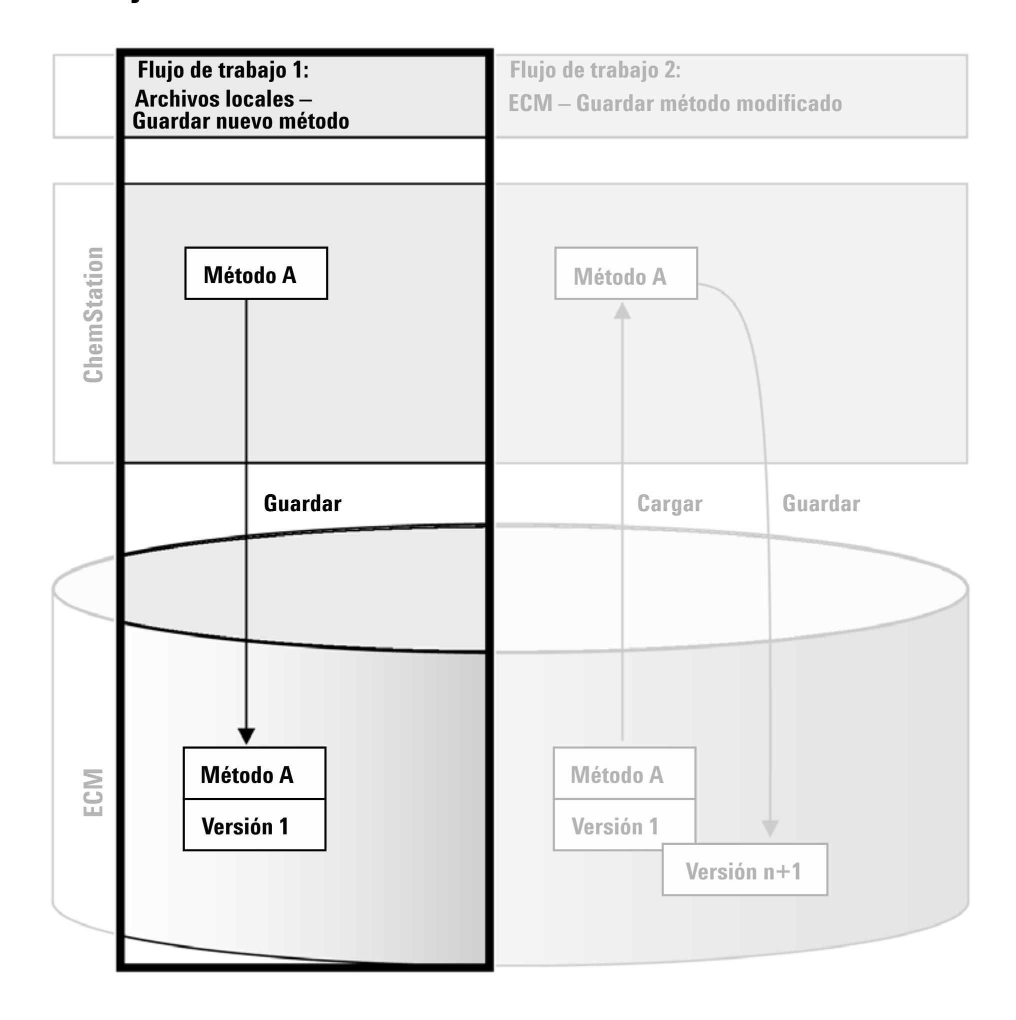


Figura 16 Archivos locales - Guardar nuevo método

El flujo de trabajo *Archivos locales – Guardar nuevo método*, consulte Figura 16 en la página 73, muestra la forma en la que los métodos o plantillas de secuencias recién creadas o almacenadas localmente pueden cargarse manualmente en ECM.

Para cargar un nuevo método o plantilla de secuencia:

1 Inicie la sesión en ECM de una ChemStation sin conexión.

2 En ChemStation, cargue el método/plantilla de secuencia o cree uno nuevo.

3 En la vista **Method and Run Control**, haga clic en **ECM > Save Method** o en **ECM > Save Sequence Template**, respectivamente.

   Se abre el cuadro de diálogo **ECM Save**.

4 Acceda a la ruta de datos remota que prefiera para cargar el método/plantilla de secuencia.

   Sólo pueden cargarse elementos en una Carpeta, no en una Ubicación, Archivador o Cajón.

5 En caso necesario, guarde el elemento con otro nombre. De forma predeterminada, se utiliza el nombre original, pero es posible modificarlo.

6 Haga clic en **Save**.

   Se abre el cuadro de diálogo **Add File**.

7 Escriba un motivo para la carga y haga clic en **OK**. El motivo se muestra después en el registro de auditoría de ECM (consulte “Registro de auditoría de ECM” en la página 90).

   El progreso de la carga se muestra en una ventana hasta que el elemento se haya cargado en ECM.

   Una vez finalizada la carga, el archivo SSIZIP estará disponible en ECM como versión 1. El archivo se guarda en la ruta de datos remotos definida en las Preferencias (consulte “Ruta de datos remotos” en la página 47).

   El icono de método del panel de navegación de ChemStation cambia de a . El icono de una plantilla de secuencia cambia de a , según corresponda.

Flujo de trabajo 2: ECM – Guardar método modificado

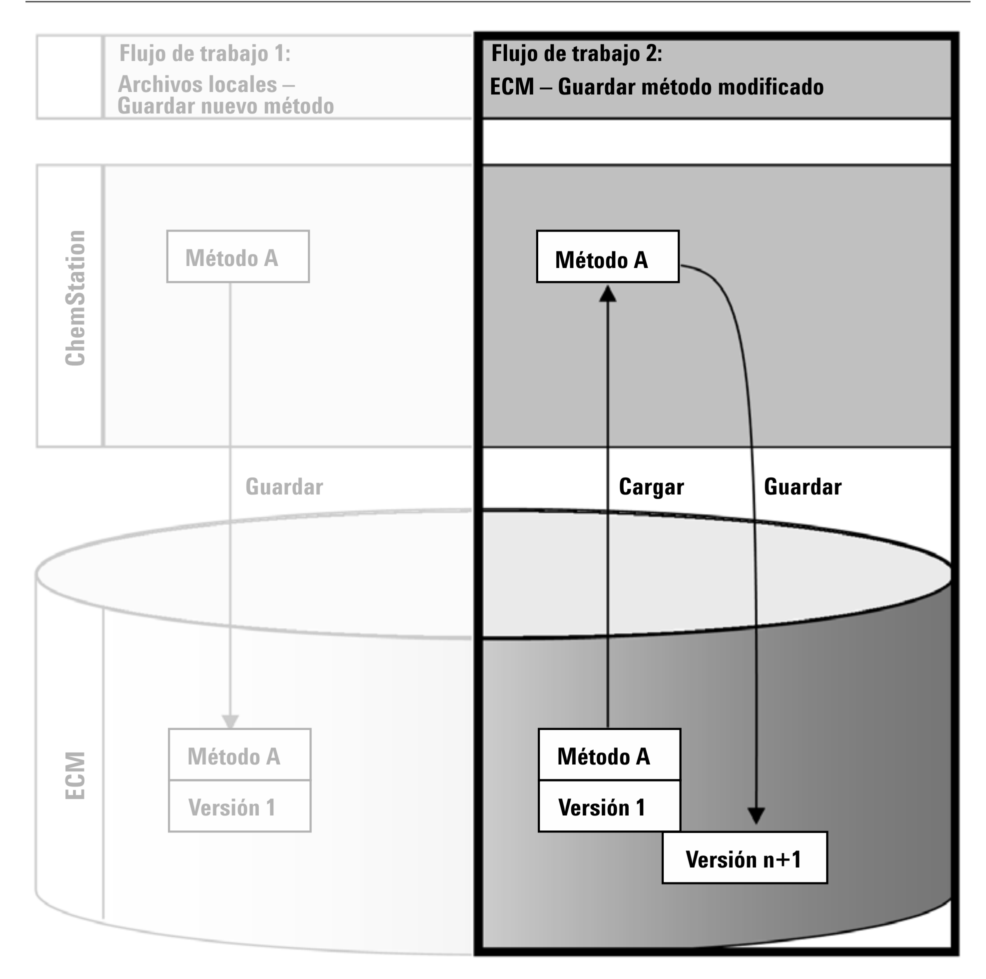


Figura 17 ECM - Guardar método modificado

El flujo de trabajo *ECM – Guardar método modificado*, consulte Figura 17 en la página 75, muestra la forma en la que los métodos o plantillas de secuencias que ya están almacenadas en ECM se editan y guardan con el mismo nombre que una versión nueva.

1 Inicie la sesión en ECM de ChemStation.

2 Cargue un método o una plantilla de secuencia.

- Abra un método o plantilla de secuencia desde su PC local. Seleccione un método o plantilla de secuencia que ya se haya cargado antes en ECM. En el panel de navegación de ChemStation, los métodos de ECM se indican con y las plantillas de secuencias de ECM, con .

o bien,

- Seleccione **ECM > Cargar método** o **ECM > Cargar plantilla de secuencia**, respectivamente, para descargar un método o plantilla de secuencia desde ECM.

Si utiliza uno de los comandos de **Load**, se abrirá el cuadro de diálogo **ECM Desktop Open**. Desplácese a la carpeta de ECM para cargar el método (**.M.SSIZIP*) o plantilla de secuencia (**.S* o **.S.SSIZIP*) que desee.

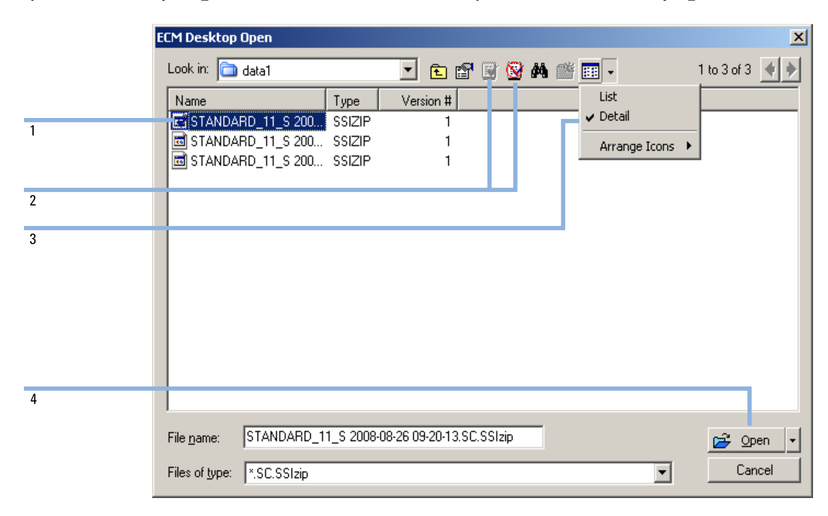


Figura 18 Cuadro de diálogo Abrir escritorio de ECM

Si el elemento está verificado, tendrá una marca con un icono azul o rojo (consulte Figura 18 en la página 76, marcador 1):

(icono azul): usted (el usuario actual) ha verificado el elemento

(icono rojo): otro usuario de ECM ha verificado el elemento

Se puede cargar cualquier elemento que esté verificado. Sin embargo, si un elemento ha sido verificado por otro usuario de ECM, éste deberá registrar el elemento antes de que usted pueda volver a guardarlo en ECM.

Para verificar o registrar un elemento, puede utilizar los iconos respectivos disponibles en el cuadro de diálogo **ECM Desktop Open** (consulte Figura 18 en la página 76, marcador 2). Mediante el uso de estos iconos sólo puede verificar la última versión de un elemento.

Para obtener más información sobre el tipo y la versión de los elementos disponibles, seleccione la vista **Detail** (consulte Figura 18 en la página 76, marcador 3). Para abrir una versión anterior de un elemento, seleccione el comando **Open Revisions** en el menú **Open** (consulte Figura 19 en la página 77, marcador 1). Con ello se abrirá el cuadro de diálogo **File Versions**, donde se enumeran todas las versiones disponibles del elemento (consulte Figura 20 en la página 78).

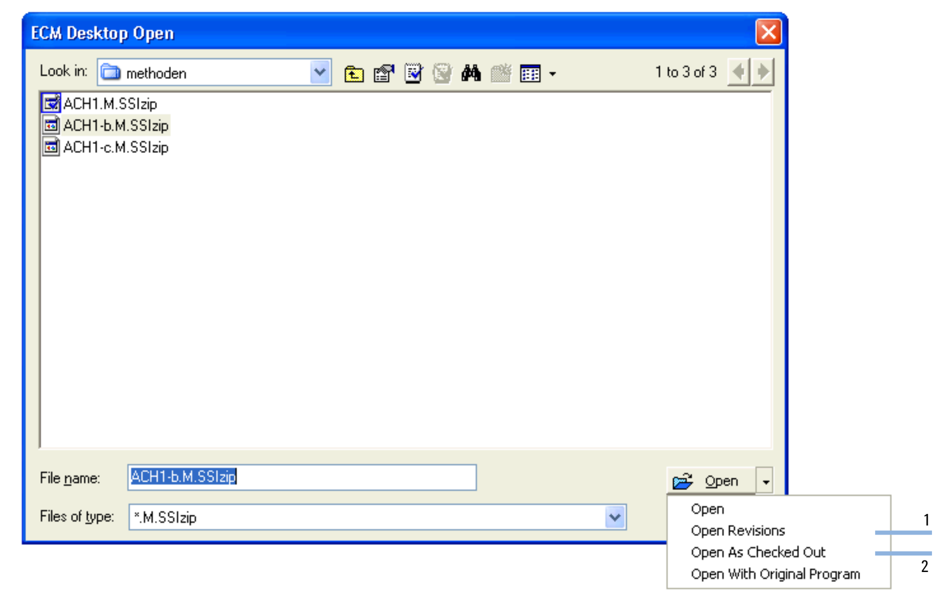


Figura 19 Comando Abrir revisiones

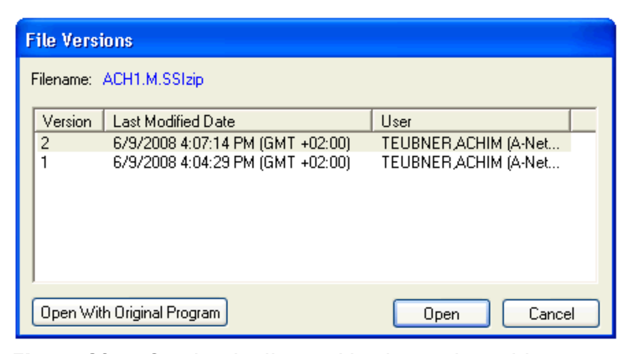


Figura 20 Cuadro de diálogo Versiones de archivo

3 Seleccione **Open** en cualquier cuadro de diálogo para descargar el elemento a ChemStation. Para evitar que otros usuarios modifiquen el elemento, puede seleccionarse el comando **Open As Checked Out** para marcar el elemento como verificado desde ECM (consulte Figura 19 en la página 77, marcador 2).

NOTA A diferencia de los archivos de datos, ECM no verifica automáticamente los métodos y las plantillas de secuencias. Para modificar dichos elementos en ChemStation, debe verificarlos manualmente desde ECM. En caso contrario, no se garantiza que trabaje con la versión más reciente.

Si el archivo ya existe en la ubicación especificada del ordenador de ChemStation, deberá seleccionarse otra ubicación de descarga.

La barra de herramientas de ChemStation muestra la ruta LCDF de la plantilla de secuencia o del método cargados.

4 Realice algunos cambios en el método o plantilla de secuencia.

 señala el método modificado.

señala plantillas de secuencia modificadas en el panel de navegación.

5 Seleccione **ECM > Guardar método** o **ECM > Guardar plantilla de secuencia** respectivamente para guardar el método o plantilla de secuencia modificada.

NOTA Si no ha verificado el método antes de cargarlo desde ECM y, mientras tanto, otro usuario ha verificado el elemento, no podrá realizar de nuevo la carga en ECM. Aparecerá un mensaje de advertencia y no podrá volver a guardar el elemento en ECM hasta que el otro usuario haya liberado el elemento verificado.

6 Cuando se abra el cuadro de diálogo **Add File**, introduzca un motivo para la carga y haga clic en **OK**. El motivo se muestra después en el registro de auditoría de ECM (consulte “Registro de auditoría de ECM” en la página 90).

   El progreso de la carga se muestra en una ventana hasta que el elemento se haya cargado en ECM.

   El archivo *.M.SSIZIP/.S* se carga con su nombre original en la ruta LCDF primaria (la ruta que aparece como explicación de la herramienta del método o plantilla de secuencia en ChemStation). El número de versión aumenta automáticamente en uno.

Actualización de la plantilla de secuencia o del método maestros locales

Si se actualiza un método maestro o una plantilla de secuencias maestra en ECM (por ejemplo, cuando se crea una nueva versión), es posible actualizar las copias locales mediante el procedimiento de actualización que se indica a continuación.

1 Asegúrese de que el método maestro o la plantilla de secuencias maestra que se van a actualizar no se encuentran cargados actualmente. El método o la plantilla de secuencia cargados actualmente no están disponibles para su actualización.

2 Seleccione **ECM > Update Methods ...** o bien **Update Sequence Templates ...**

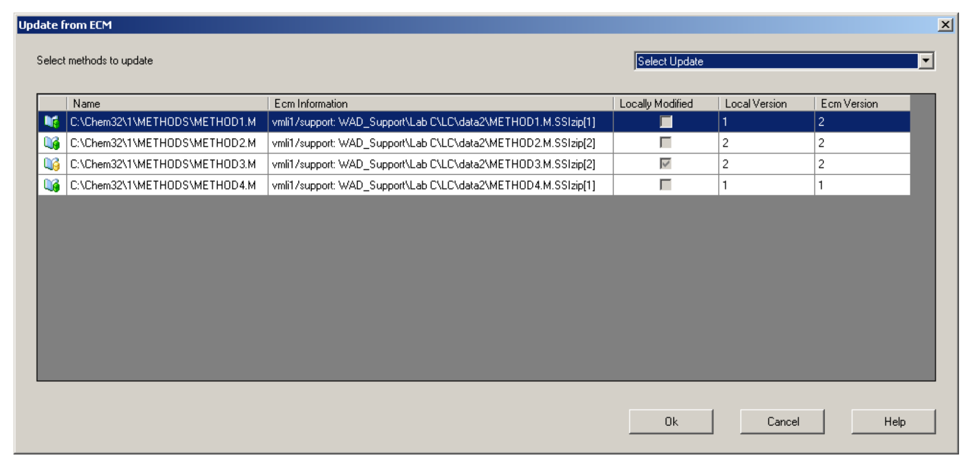


Figura 21 Cuadro de diálogo Actualizar métodos

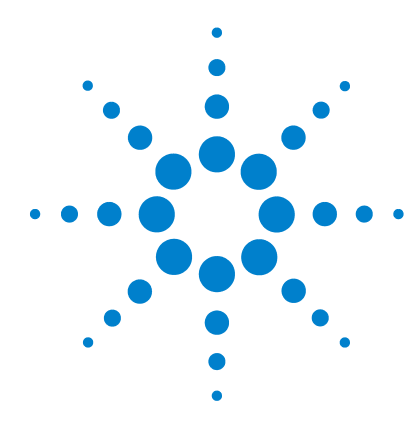
Aparecerá el cuadro de diálogo **Update from ECM**.

En el cuadro de diálogo se enumeran todos los métodos relacionados con ECM. Las columnas disponibles son las siguientes:

- **Name**: ruta y nombre de la copia local del método o plantilla de secuencia.
- **ECM Information**: servidor de ECM, información de la cuenta y ruta LCDF del archivo en ECM.
- **Locally Modified**: casilla de verificación que indica si la copia local se ha modificado.
- **Local Version**: número de versión de la copia local del método o plantilla de secuencia.
- **ECM Version**: número de versión del archivo en ECM.

3 En este momento podrá seleccionar los métodos que se van a actualizar. Como alternativa, desde la lista desplegable, podrá realizar las siguientes acciones: eliminar la selección de todos los métodos, seleccionar todos los métodos, seleccionar únicamente aquellos métodos con un número de versión mayor en ECM, o bien seleccionar todos los métodos que se hayan modificado localmente.

Una vez que pulse Aceptar, se actualizarán las plantillas de secuencias y los métodos locales con la versión en ECM.



5
Administración respecto a la conformidad con la norma 21 CFR, Parte 11

Introducción a la norma 21 CFR, Parte 11 82
- Requisitos de la norma 21 CFR, Parte 11 83
- Aspectos generales de seguridad de datos en redes computerizadas – Sistemas abiertos frente a sistemas cerrados. 83

Introducción de los pasos de configuración necesarios para la Parte 11 85

Registro de auditorías y libros de registro 87
- Registro de auditoría de métodos 87
- Registro de auditoría de resultados 88
- Historial de informes 89
- Registro de auditoría de ECM 90
- Registro del sistema ECM 91

Administración en ECM 93
- Configuración de cuentas 93
- Usuarios/Grupos/Funciones 94

Administración de los parámetros de ChemStation 97
- Herramienta de administración de ChemStation 97

Firma electrónica 101
- Preparación 101
- Uso de firmas electrónicas 102

En este capítulo se explica el objetivo de la norma 21 CFR, Parte 11, y su implantación en ChemStation con la opción ChemStation OpenLAB.



Introducción a la norma 21 CFR, Parte 11

En vigor desde el 20 de agosto de 1997, la Administración de alimentos y fármacos (FDA) de EE.UU. emitió y publicó una nueva ley para permitir a las empresas farmacéuticas aprobar sus resultados con firmas electrónicas y transferir la documentación en papel a registros electrónicos. Esta norma se conoce como Código 21 de Regulaciones Federales, Parte 11, (denominada 21 CFR, Parte 11) y se aplica a todos los sectores industriales regulados por la FDA.

El impacto de esta norma sobre las prácticas actuales de trabajo y la manipulación de datos en la industria farmacéutica es mucho mayor de lo esperado. *"El sector quería tener una norma sobre las firmas electrónicas, pero lo que se obtuvo fue una norma sobre los registros electrónicos"*. (Martin Browning, antiguo inspector de la FDA durante un seminario de validación de Washington D.C.)

La norma 21 CFR, Parte 11, hace un gran hincapié en la implantación de todas las medidas necesarias para proteger y garantizar los registros electrónicos. A pesar de las incertidumbres y de los cambios que la norma 21 CFR, Parte 11 exige en el comportamiento tanto del sector farmacéutico como de los proveedores de equipos de análisis químicos, su implantación es muy valiosa en los laboratorios de hoy en día debido a que puede ayudar al sector a solventar uno de los problemas más importantes de la investigación farmacéutica: el lanzamiento rápido al mercado de nuevos fármacos.

Las principales ventajas de este cambio hacia la gestión electrónica de los datos residen en el potencial aumento de la productividad para el sector. El sector puede reducir la impresión de datos en papel, acelerar la revisión de los datos y el proceso de autorización y beneficiarse de la nueva tecnología de automatización basada en un control computerizado de sistemas, por ejemplo, en la fabricación o en pruebas de lanzamiento de fármacos de disolución.

Además de esta norma sobre registros electrónicos, se ha informado al auditor de otros requisitos generales para sistemas computerizados. Estas normas cubren los requisitos básicos de validación que limitan el acceso a los datos y garantizan su integridad y posibilidad de seguimiento.

Naturalmente, es el sector quién debe asegurarse de que sus prácticas de trabajo cumplan las normas de la FDA, pero la mayoría de los requisitos afectan también a los sistemas de análisis químicos y a los proveedores de dichos sistemas.

Requisitos de la norma 21 CFR, Parte 11

Para cumplir las normas de la FDA y las directrices para registros electrónicos adaptables y sistemas computerizados, es importante comprender los aspectos básicos de la manipulación segura de datos.

- *Seguridad de los datos:* protección física de los datos limitando el acceso al sistema e impidiendo accesos no autorizados.
- *Integridad de los datos:* protección de datos primarios y metadatos y prevención frente a modificaciones no autorizadas de los mismos, así como la vinculación de datos primarios y resultados para reproducir en cualquier momento los resultados originales, por ejemplo, en caso de auditoría y al documentar cada copia de resultados nuevos.
- *Posibilidad de seguimiento de auditoría:* documentación de quién utilizó los resultados y cuándo lo hizo, seguimiento del usuario que haya agregado versiones reanalizadas a los datos primarios originales.

Aspectos generales de seguridad de datos en redes computerizadas – Sistemas abiertos frente a sistemas cerrados.

Antes de tratar los detalles de la seguridad de los datos en un sistema cromatográfico, es necesario tener en cuenta algunos aspectos generales de la seguridad de los datos en una red computerizada.

Es sabido por todos que personas externas no autorizadas, “hackers”, pueden obtener acceso a transferencias de datos a través de una red pública, tanto para entretenimiento personal como para fraudes intencionados.

Si se utiliza una identificación electrónica formada por un Id. de usuario y una contraseña para autorizar datos confidenciales o importantes, el usuario debe estar seguro de que sus firmas están estrechamente vinculadas con los datos y que nadie pueda copiar esta firma ni acceder a las contraseñas. En un sistema público, esto puede requerir una tecnología de cifrado adicional, por ejemplo,

una combinación de claves privadas y públicas para el cifrado de los datos. Por contra, si un sistema computerizado está protegido frente a accesos no autorizados, los usuarios pueden estar seguros de la privacidad de sus firmas y ninguna persona no autorizada podrá acceder a las mismas.

La FDA distingue, asimismo, entre estos dos escenarios y los define como sistemas *abiertos* y *cerrados*. Por lo tanto, un sistema de red *pública* sólo puede verse como un sistema abierto y una red protegida, como un sistema cerrado, siempre que cumpla unos requisitos adicionales.

En términos de la FDA, *“sistema cerrado significa un entorno en el que el acceso está controlado por personas que son responsables del contenido de los registros electrónicos de dicho sistema”* (11.3.5). La evidencia de que un sistema sea un sistema cerrado no es una comprobación puntual, sino un proceso continuo de ejecución y documentación de controles del sistema que garantice que el sistema está cerrado. Por el contrario, en un sistema abierto, *“las personas responsables del contenido de los registros electrónicos no controlan el acceso al sistema”*.

Como resultado, los sistemas abiertos precisan de una tecnología de cifrado adicional para todas las transferencias de datos a través de la red.

La opción ChemStation OpenLAB está diseñada para ello y es compatible con sistemas cerrados.

Introducción de los pasos de configuración necesarios para la Parte 11

Si desea configurar la opción ChemStation OpenLAB para que cumpla la norma 21 CFR, Parte 11, deberá realizar las siguientes comprobaciones:

- Estructura LCDF del servidor de ECM preparada de acuerdo a sus necesidades

  Consulte "Almacenamiento de datos en ECM" en la página 16.

- Opción ChemStation OpenLAB instalada en el servidor de ECM

  Consulte "Actualización de la base de datos de ECM" en la página 22.

- Funciones/usuarios/grupos de ECM configurados

  Consulte "Configuración de usuarios, funciones y privilegios" en la página 25.

- Configuración de cuenta de ECM con registro de auditoría activo y motivo obligatorio

  Consulte "Para habilitar el registro de auditoría de ECM" en la página 90 y "Configuración de cuentas" en la página 93.

- Política de contraseña llevada a cabo en ECM (incluida la notificación por correo electrónico)

  Consulte "Para configurar los parámetros de contraseña de una cuenta de ECM de acuerdo con la política de contraseñas" en la página 94.

- Firmas electrónicas preparadas (mensajes y privilegios)

  Consulte "Uso de firmas electrónicas" en la página 102.

- ChemStation con la opción ChemStation OpenLAB e inicio de sesión en ECM obligatorio

  Consulte "Instalación de una ChemStation nueva con la opción ChemStation OpenLAB" en la página 29.

- Configuración de transferencia automática de datos y Configuración de administración de transferencias activadas

  Consulte "Preferencias de ECM" en la página 46.

- Registro de auditoría activado para métodos y resultados

Consulte “Registro de auditoría de métodos” en la página 87 y “Registro de auditoría de resultados” en la página 88.

- Plan de emergencia disponible, basado en las opciones de la herramienta de administración

  Consulte “Herramienta de administración de ChemStation” en la página 97.

Registro de auditorías y libros de registro

Con el propósito de cumplir la norma 21 CRF, Parte 11, la opción ChemStation OpenLAB ofrece distintos registros de auditoría y libros de registros para documentar todas las actividades asociadas a los métodos, resultados, informes o, de forma general, a los archivos de ECM. Estos registros de auditoría y libros de registros realizan el seguimiento de todos los cambios realizados en cualquier archivo, incluida la adquisición de datos, reanálisis y archivado a largo plazo

y se almacenan en archivos independientes que se guardan con los datos de métodos o muestras. Los archivos de registros de auditoría se archivan con el resto de los datos en los archivos SSIZIP correspondientes. Los libros de registro de ECM sólo están disponibles directamente en ECM.

Registro de auditoría de métodos

Cada método cuenta con un registro de auditoría de métodos. De forma predeterminada, este registro de auditoría de métodos únicamente incluye los comentarios que deben introducirse cada vez que se guarda un método. Como no hay control sobre el texto introducido, no existe garantía de que las modificaciones del método puedan reproducirse.

Respecto a la norma 21 CFR, Parte 11, la opción ChemStation OpenLAB posibilita la generación de un registro de auditoría de métodos más detallado. Si la función está activada, el registro de auditoría de métodos no sólo incluye los comentarios del usuario, sino también cada parámetro modificado individualmente con el valor anterior y el nuevo. Se realiza el seguimiento de todos los parámetros de análisis de datos que pueden modificarse. Esto implica que se pueda reproducir exactamente los valores que se han modificado a qué, cuándo y por quién.

Para habilitar el registro de auditoría para todos los métodos

Necesario si desea cumplir la norma 21 CFR, Parte 11.

1 Seleccione **View > Preferences**
2 En el cuadro de diálogo **Audit Trail Status**, seleccione **Enable Audit Trail for this method** y haga clic en **OK**.

Una vez habilitado, el registro de auditoría de métodos no puede deshabilitarse.

NOTA También se puede utilizar la herramienta de administración de ChemStation para habilitar el registro de auditoría para todos los métodos (consulte "Herramienta de administración de ChemStation" en la página 97).

Para habilitar el registro de auditoría de métodos únicamente para el método abierto en este momento

También es posible activar el registro de auditoría de métodos para un sólo método. Esto puede resultar útil, por ejemplo, cuando ha finalizado el desarrollo de un nuevo método y desea realizar el seguimiento de cualquier cambio adicional.

1 Seleccione **Method > Enable Audit Trail**

2 En la ficha **Audit Trail**, seleccione **Enable Method Audit Trail for all methods**.

Para ver el registro de auditoría de métodos para el método que en este momento está abierto en ChemStation

1 Seleccione **Method > Method Audit Trail**

Para eliminar el registro de auditoría de métodos detallado

Una vez habilitado un método para el registro de auditoría detallado, ya no es posible deshabilitarlo. La única forma de liberarse de un registro de auditoría de métodos existente consiste en guardar el método con otro nombre. En dicho caso, la única indicación en el registro de auditoría del nuevo método es un comentario sobre el método basado en otro método.

Registro de auditoría de resultados

Los eventos de integración manuales no se guardan en el método. Por consiguiente, el registro de auditoría de métodos no contiene información sobre eventos de integración manual. Estos eventos sólo se guardan en el archivo de datos. Sin embargo, influyen en los resultados. Por tanto, los eventos de integración manual se guardan como parte del registro de auditoría de resultados.

En el caso de activarse, este registro de auditoría de resultados se agrega al libro de registro de archivos de datos existente (nombre de archivo RUN.LOG). De forma predeterminada, el libro de registro de archivos de datos incluye únicamente los parámetros de adquisición y la información de reprocesamiento de cada muestra. El registro de auditoría de resultados rastrea los cambios de todos los parámetros de análisis de datos de una muestra.

Para habilitar el registro de auditoría de resultados

Al habilitar el registro de auditoría de resultados, se realiza el seguimiento de los cambios relevantes de *todas* las muestras, independientemente de la secuencia a la que pertenezcan y del usuario que realice el cambio.

1 Seleccione **View > Preferences**

2 En la ficha **Audit Trail**, seleccione **Enable Results Audit Trail**.

Para ver el registro de auditoría de resultados de la muestra cargada en ChemStation

1 En la vista **Data Analysis**, seleccione **View > Current Data File Logbook**.

Historial de informes

Al crear un informe de ChemStation, es posible visualizar el informe en la pantalla, enviarlo a una impresora o guardarlo como archivo específico (*report.pdf*). Estos informes pueden perderse o sobrescribirse fácilmente, en especial cuando se crean varios, uno después de otro.

Con la opción ChemStation OpenLAB, ChemStation realiza automáticamente el seguimiento de cualquier informe que se haya generado. Para reproducir un informe anterior o sobrescribirlo, seleccione **Report > Report History**. Aquí se pueden ver todos los informes creados para el archivo de datos actual desde la instalación de la opción ChemStation OpenLAB. Asimismo, es posible exportar o imprimir este historial.

Registro de auditoría de ECM

El registro de auditoría es una recopilación que muestra quién accedió al sistema y las operaciones que realizó durante un periodo de tiempo determinado.

Es posible visualizar entradas relacionadas con archivos, administración del sistema, administración de carpetas o relativas a la planificación. Por ejemplo, es posible ver cuándo se agregó un archivo y quién lo hizo.

Para cada operación, ECM solicita un motivo al usuario. Este motivo también se muestra en el registro de auditoría de ECM. Para las cargas automáticas, el sistema aporta motivos predeterminados. La introducción de un motivo puede ser opcional u obligatoria, según la configuración de ECM (consulte “Configuración de cuentas” en la página 93). Si el sistema está configurado para que cumpla la norma 21 CFR, Parte 11, es obligatorio proporcionarlo.

Para habilitar el registro de auditoría de ECM

El registro de auditoría de ECM sólo puede habilitarse para una cuenta de ECM completa. Para habilitar el registro de auditoría de ECM, es necesario marcar la casilla de verificación **Enable audit trail for this account** al crear una cuenta nueva.

No es posible activar posteriormente el registro de auditoría de ECM para una cuenta existente, ni desactivarlo de nuevo.

NOTA Si el sistema tiene que cumplir la norma 21 CFR, Parte 11, el registro de auditoría de ECM debe estar habilitado.

Para ver el registro de auditoría de ECM de un archivo específico

1 En ECM, haga clic con el botón secundario del ratón en el archivo correspondiente y, en el menú contextual, seleccione **Properties**.
2 En el cuadro de diálogo **File Properties**, seleccione la ficha **Audit Trail**.

   Aquí se enumeran todas las acciones relacionadas con este archivo específico, junto con la fecha, el nombre de usuario de ECM que realizó la acción y un motivo introducido por el usuario correspondiente.

Para ver el registro de auditoría de ECM para todos los archivos

1 En ECM, seleccione la página **Administration**.
2 En el panel de navegación, seleccione el nodo **Activity Log > Audit Trail**.

Aquí se enumeran todas las acciones relacionadas con cualquier archivo de ECM, junto con el nombre del archivo, la fecha, el nombre de usuario de ECM que realizó la acción y un motivo introducido por el usuario correspondiente.

Se pueden buscar entradas, por ejemplo, por una fecha o rango de fechas específicos o por entradas relacionadas con categorías específicas (Archivos, Carpetas, Sistema, Programador o Instrumento). Además, las entradas se pueden imprimir o exportar a un archivo.

Registro del sistema ECM

El registro del sistema es una recopilación que muestra los cambios en el sistema, incluidos cambios de configuración, notificaciones de correo electrónico y adiciones o modificaciones de las Ubicaciones, Archivadores, Cajones o Carpetas.

Es posible visualizar entradas relacionadas con archivos, administración del sistema, administración de carpetas o relativas a la planificación. Por ejemplo, es posible ver cuándo se agregó una Ubicación y quién lo hizo.

El registro del sistema siempre está activo; no es necesario habilitarlo.

Para ver el registro del sistema ECM

1 En ECM, seleccione la página **Administration**.
2 En el panel de navegación, seleccione el nodo **Activity Log > System Log**.

Aquí se enumeran todas las acciones generales relacionadas con ECM, junto con la fecha, el nombre de usuario de ECM que realizó la acción y un motivo introducido por el usuario correspondiente. Dependiendo de la administración de la cuenta de ECM, el motivo puede ser opcional u obligatorio (consulte “Configuración de cuentas” en la página 93).

Se pueden buscar entradas, por ejemplo, por una fecha o rango de fechas específicos o por entradas relacionadas con categorías específicas (Archivos, Carpetas, Sistema, Programador o Instrumento). Además, las entradas se pueden imprimir o exportar a un archivo.

Administración en ECM

Al instalar la opción ChemStation OpenLAB, es necesario realizar ciertas tareas de configuración básicas en ECM (consulte “Tareas de instalación y configuración en un servidor de ECM” en la página 22). Asimismo, hay algunos otros parámetros de ECM que son importantes en lo que se refiere a la norma 21 CFR, Parte 11. Estos parámetros se describen en la siguiente sección.

Configuración de cuentas

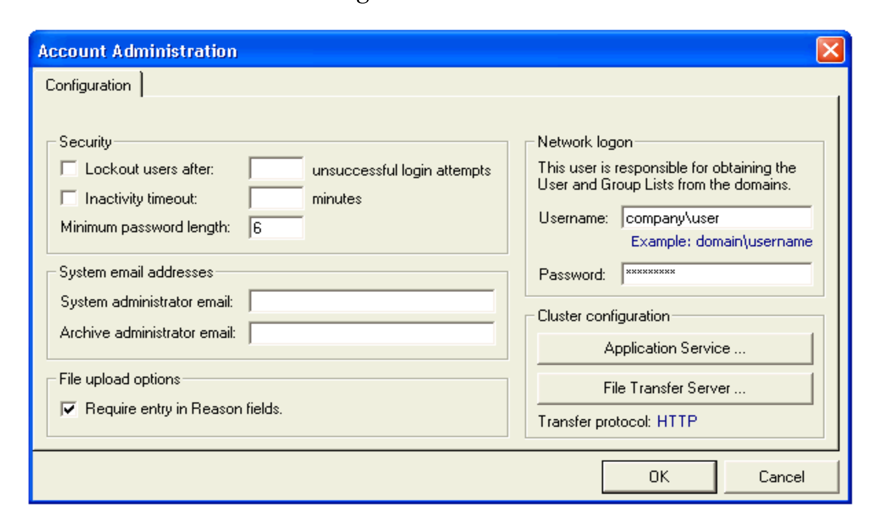
Para configurar la cuenta de ECM

1 En ECM, seleccione la página **Administration**.

2 En el panel de navegación, seleccione el nodo **Account Administration**.

3 Haga doble clic en el elemento **Configuration**.

Se abrirá el cuadro de diálogo **Account Administration**.



Configuración	Descripción	Requisitos de la norma 21 CFR, Parte 11
Lockout	Si un usuario intenta iniciar sesión con demasiada frecuencia utilizando credenciales de usuario no válidas, el sistema lo bloquea y no podrá volver a conectarse a él, ni siquiera aunque introduzca las credenciales de usuario válidas. Es posible definir el número de intentos de inicio de sesión permitidos.	Dicho número de intentos de inicio de sesión deberá limitarse a tres.
Inactivity Timeout	Si un usuario no realiza ninguna acción en ChemStation durante el periodo de tiempo especificado, la sesión se cierra automáticamente. Lo mismo se aplica al cliente web de ECM.	Deberá especificar un tiempo de espera.
System administrator email	La dirección de correo electrónico aquí indicada se proporcionará automáticamente cuando un usuario quede bloqueado tras demasiados intentos de inicio de sesión incorrectos.	Es necesario proporcionar una dirección de correo electrónico.
Minimum Password Length	Si los usuarios modifican su contraseña, deberán seleccionar una contraseña que tenga, como mínimo, el número de caracteres indicado. El valor predeterminado es *5*.	Deberá exigir una longitud de contraseña mínima de 5 caracteres.
Require entry in Reason fields	En cada entrada del registro de auditoría de ECM o del registro del sistema, el usuario puede agregar un motivo específico para la acción. Si esta casilla de verificación está marcada, la entrada será obligatoria.	La inclusión de los motivos del registro de auditoría de ECM y del registro del sistema debe ser obligatoria.

Usuarios/Grupos/Funciones

Para configurar los parámetros de contraseña de una cuenta de ECM de acuerdo con la política de contraseñas

NOTA La norma 21 CFR, Parte 11, exige que la empresa/laboratorio tenga una política de contraseñas.

1 En ECM, seleccione la página **Administration**.
2 En el panel de navegación, seleccione el nodo **Account Administration**.
3 Haga doble clic en el elemento **Users/Groups/Roles**.

Se abrirá el cuadro de diálogo **Account Administration**.

La norma 21 CFR, Parte 11, no define ninguna regla específica para la configuración de contraseñas. Sin embargo, su empresa debe haber definido una política de contraseñas. Puede tener en cuenta los siguientes parámetros:

- El usuario no puede modificar la contraseña
- El usuario debe cambiar la contraseña la próxima vez que inicie sesión

Tenga en cuenta que la longitud mínima de la contraseña está definida en la configuración de la cuenta de ECM (consulte “Configuración de cuentas” en la página 93).

Funciones y carpetas

ECM permite asignar funciones específicas a usuarios o grupos de usuarios. Dichas asignaciones pueden hacerse a nivel global para toda la cuenta de ECM o de forma individual para carpetas específicas. Por ejemplo, un grupo de usuarios determinado puede tener una función **Contributor** para la carpeta A y, al mismo tiempo, tener sólo la función **Reader** para la carpeta B.

Preparaciones Si desea asignar funciones en el nivel de carpeta, debe habilitar en primer lugar esta función en ECM. El ajuste se aplica a toda la cuenta de ECM.

Para habilitar funciones para carpetas:

1 En ECM, seleccione la página **Administration**.
2 En el panel de navegación, seleccione el nodo **Account Administration**.
3 Haga doble clic en el elemento **Users/Groups/Roles**.
   Se abrirá el cuadro de diálogo **Account Administration**.
4 En la ficha **Roles**, seleccione la función que desee y haga clic en **Edit**.
5 Marque la casilla de verificación **Available in folder access tab**.

Administración de los parámetros de ChemStation

Herramienta de administración de ChemStation

La herramienta de administración de ChemStation aporta varias funciones que resultan útiles en caso de desactivación del servidor de ECM y pérdida de la conexión entre el cliente de ChemStation y el servidor de ECM. Dado que una de esas funciones es cambiar el inicio de sesión obligatorio de ECM, el acceso a la herramienta de administración de ChemStation debe estar limitado de forma estricta. Sólo los usuarios que sean miembros del grupo local **CSAdministrators** pueden iniciar la herramienta de administración de ChemStation (consulte "Permitir a los usuarios iniciar la herramienta de administración de ChemStation" en la página 34).

Para iniciar la herramienta de administración de ChemStation:

1 En el menú de inicio de la barra de tareas, seleccione **Start > All Programs > Agilent ChemStation > ChemStation Administration Tool**.

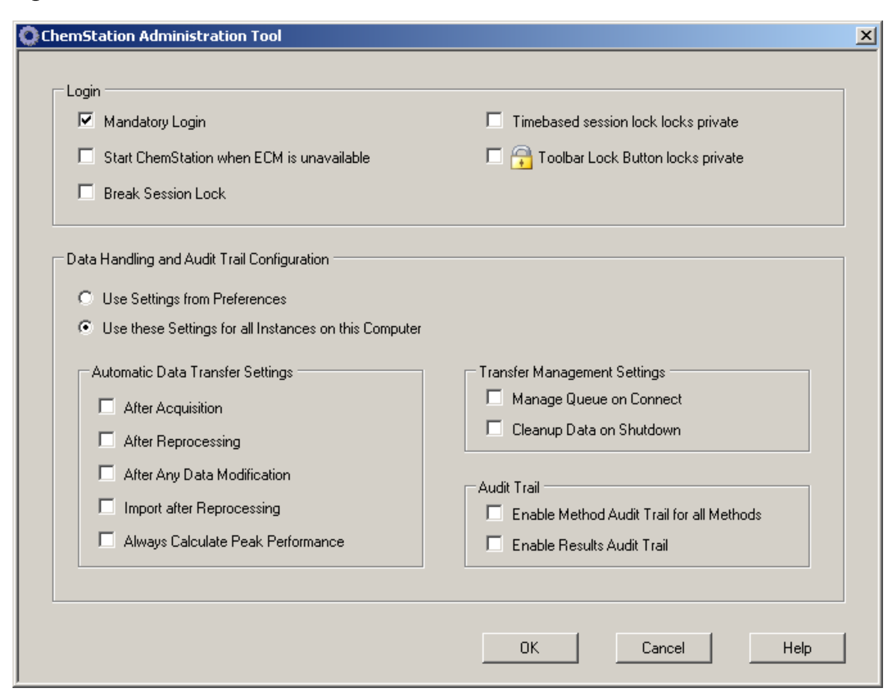


Figura 22 Herramienta de administración de ChemStation

Opciones de inicio de sesión

Las casillas de verificación siguientes son importantes en caso de emergencia, es decir, si se desactiva el servidor de ECM:

- **Mandatory Login**: si desactiva esta casilla de verificación, todas las instancias de ChemStation en este cliente pueden iniciarse sin iniciar sesión en ECM. Si el inicio de sesión en ECM solía ser obligatorio y el servidor de ECM se desactiva, es posible desactivar esta casilla de verificación para que ChemStation esté disponible de nuevo.

NOTA Tenga en cuenta que, como consecuencia, ahora los privilegios de los usuarios de ChemStation están limitados. Los usuarios tienen acceso a todas las funciones de ChemStation.

- **Start ChemStation when ECM is unavailable**: Al marcar esta casilla de verificación, la ChemStation podrá iniciarse cuando el servidor de ECM no se encuentre disponible, incluso con la opción **Mandatory Login** habilitada. Es posible cancelar el cuadro de diálogo de inicio de sesión al iniciar la ChemStation. Con esta opción seleccionada, cualquier usuario puede seguir trabajando en la ChemStation en caso de caída del servidor sin tener que ponerse en contacto con un usuario con acceso a la herramienta de administración.

NOTA Tenga en cuenta que, como consecuencia, ahora los privilegios de los usuarios de ChemStation están limitados. Los usuarios tienen acceso a todas las funciones de ChemStation.

- **Break Session Lock**: si se marca esta casilla de verificación, cualquier usuario puede acceder a una ChemStation bloqueada con sólo hacer clic en **Cancel** en el cuadro de diálogo **Login**. Si hay una ChemStation bloqueada y se desactiva el servidor de ECM, la activación de esta casilla de verificación es la única posibilidad de volver a tener acceso a la sesión actual de ChemStation.

NOTA Tenga en cuenta que, como consecuencia, el usuario que vuelva a obtener acceso a ChemStation tendrá ahora acceso ilimitado a todas las funciones de ChemStation.

Las siguientes casillas de verificación le permiten configurar el bloqueo de sesión en función del tiempo y el botón de bloqueo de la barra de herramientas de ChemStation:

- **Timebased session lock locks private**: al marcar esta casilla de verificación, el bloqueo de sesión en función del tiempo bloqueará las sesiones de ChemStation de forma privada. De lo contrario, el bloqueo de sesión en función del tiempo no será privado.
- **Toolbar Lock Button locks private**: al marcar esta casilla de verificación, el botón de bloqueo de la barra de herramientas bloqueará la sesión de ChemStation de forma privada. De lo contrario, el bloqueo que se aplicará no será privado.

Gestión de datos y configuración del registro de auditoría

La herramienta de administración de ChemStation permite configurar cómodamente y con los mismos parámetros todas las instancias de ChemStation de un cliente a la vez. De forma predeterminada, la opción **Use instance specific settings** está seleccionada, por lo que estos parámetros no se sobrescriben.

Para modificar los parámetros de todas las instancias de ChemStation

1 Seleccione la opción **Use these settings for all instances on this computer**.

2 Marque las casillas de verificación necesarias. Los parámetros son los mismos que los del cuadro de diálogo **Preferences** (consulte “Preferencias de ECM” en la página 46).

3 Haga clic en **OK**.

Firma electrónica

Las firmas electrónicas representan un medio de firmar documentos igual de vinculante que una firma hecha a mano. Además, las firmas electrónicas son reproducibles, ya que se graban en un registro de auditoría seguro y marcado con la hora. La manipulación se previene permitiendo que sólo los usuarios con privilegios específicos puedan firmar electrónicamente.

Una firma electrónica contiene el nombre de usuario (nombre completo), fecha y hora en la que se realizó la firma, la ubicación en la que tuvo lugar y una definición configurable por el usuario asociada con la firma. La firma siempre está relacionada con el contenedor SSIZIP completo, no con un único archivo del contenedor.

La norma CFR 21, Parte 11, exige que las empresas, especialmente las que utilicen cualquier tipo de proceso de autorización, empleen firmas electrónicas. Con la ayuda del módulo Gestor de procesos empresariales (BPM) de OpenLAB de Agilent, es posible crear procesos de revisión o autorización altamente automatizados que incluyan notificación por correo electrónico.

Preparación

Privilegios

Un usuario de ECM tiene que tener el privilegio **Content: File Signatures** para poder firmar electrónicamente. Este privilegio se asigna, por ejemplo, a la función predeterminada de ECM: **:Approver**.

Motivos de la firma

Con cada firma, los usuarios de ECM deben seleccionar un motivo determinado, o bien, si están autorizados para ello, proporcionar un motivo propio.

Para configurar los motivos para las firmas:

1 En ECM, seleccione la página **Administration**.

2 En el panel de navegación, seleccione el nodo **Account Administration**.

3 Haga doble clic en el elemento **Electronic Signature**.

Se abrirá el cuadro de diálogo **Account Administration**.

4 Para proporcionar un motivo nuevo, escriba el texto necesario en el campo **Reasons** y haga clic en .

5 Para eliminar un motivo ya existente, selecciónelo en la lista **Default reasons** y haga clic en .

6 Si desea permitir a los usuarios que introduzcan su propio motivo con una firma, marque la casilla de verificación **User can specify reason**.

NOTA Si elimina la marca de esta casilla, los usuarios sólo podrán seleccionar uno de los motivos predeterminados que aparecen.

7 En caso necesario, configure el tiempo de espera:

- El **Signature screen timeout** define el tiempo que permanece abierto el cuadro de diálogo de firma electrónica sin que se envíe ninguna firma. El valor predeterminado es de 5 minutos.
- El **Consecutive signature timeout** sólo es importante si el usuario de ECM efectúa varias firmas electrónicas consecutivas. Si la siguiente firma electrónica se realiza dentro del intervalo de tiempo definido, la **location** y el **reason** introducidos para la primera firma electrónica se incluirán previamente en el siguiente cuadro de diálogo. El valor predeterminado para el tiempo de espera de firmas consecutivas es de 5 minutos.

Uso de firmas electrónicas

Para aplicar una firma electrónica

1 Haga clic con el botón secundario del ratón en el contenedor SSIZIP y, en el menú contextual, seleccione **Electronically Sign > Electronic Signature**.

Se abrirá el cuadro de diálogo **Electronic Signature**.

NOTA El otro comando del menú contextual, **Electronically Sign > Acrobat Plug-In Signature**, sólo funciona con documentos PDF y únicamente si se adquiere el complemento correspondiente. Con ello podrá agregar directamente firmas a documentos PDF.

2 Introduzca sus credenciales de usuario de ECM (nombre de usuario, contraseña y dominio).

3 Introduzca su ubicación actual. Con esta información, puede reproducirse la ubicación en la que se proporciona la firma.

4 Seleccione un motivo para la firma entre los que aparecen en la lista desplegable**Default reason**.

O bien,

marque la casilla de verificación **User specified** y escriba otro motivo en el campo de texto. Tenga en cuenta que esta opción sólo está disponible si la cuenta de ECM está configurada para ello.

5 Haga clic en **Sign**.

El archivo ya está firmado electrónicamente. La firma electrónica aparece en las propiedades del archivo, en la ficha **eSig**. También se incluye en el registro de auditoría de ECM.

Para ver firmas electrónicas

Es posible configurar las preferencias de usuario en ECM para que en la vista de contenido de ECM se muestre de forma predeterminada el número de firmas electrónicas aplicadas a un archivo, junto al nombre y estado del mismo.

La propia firma electrónica se muestra en las propiedades del archivo en la ficha **eSig** y también forma parte del registro de auditoría de ECM.

Para ajustar las preferencias de usuario:

1 En ECM, seleccione la página **Administration**.

2 En el panel de navegación, seleccione el nodo **Account Administration**.

3 Haga doble clic en el elemento **User Preferences**.

4 Para modificar los parámetros de columna, haga clic en **Modify...**.

5 Seleccione **# of signatures** y haga clic en ➔ para agregar esta propiedad a las columnas seleccionadas.

6 Haga clic en **OK**.

De este modo, el número de firmas electrónicas aparecerá en todas las páginas de contenido de ECM.



6
Campos personalizados

Acerca de los campos personalizados 106
Configuración de campos personalizados 107
Para definir nuevos campos personalizados 107
Para importar campos personalizados desde un método existente 109
Especificación de valores de campos personalizados 110
Para proporcionar valores de campos personalizados de muestras 110
Para proporcionar valores de campos personalizados de compuestos: 111
Elaboración de informes de campos personalizados 112
Para mostrar campos personalizados en informes de ChemStation 112
Reprocesamiento con campos personalizados 114

En este capítulo se explica para qué se utilizan los campos personalizados en ChemStation y cómo se utilizan.

Acerca de los campos personalizados

ChemStation proporciona un gran número de campos en los que se puede introducir información sobre una secuencia, muestras específicas o los compuestos esperados. Estos campos son suficientes para muchas tareas de análisis estándar. Sin embargo, es posible que para algunas tareas determinadas sea necesario guardar información adicional sobre las muestras o los compuestos. En este caso, pueden definirse los llamados *campos personalizados*.

Existen campos personalizados para la información de las muestras así como de los componentes. La definición de dichos campos se guarda como parte de la definición del método. Al definir campos personalizados, es posible definir un nombre de campo y un tipo de datos adecuados para el tipo de información adicional en función de sus necesidades.

Una vez definidos los campos personalizados, podrá introducir los valores reales en la tabla de secuencia de la secuencia actual. Estos valores se mostrarán en los informes de ChemStation y estarán disponibles también para los informes de inteligencia de OpenLAB. En estos últimos, los valores pueden utilizarse incluso para cálculos o evaluaciones estadísticas.

Asimismo, se puede utilizar campos personalizados para marcar todas las muestras relacionadas con un estudio o proyecto específico. El generador de informes de inteligencia de OpenLAB utilizará después esta marca para encontrar todos los resultados relacionados con este estudio o proyecto determinado.

Configuración de campos personalizados

La definición de los campos personalizados forma parte del método. Es posible definir un máximo de diez campos personalizados relacionados con las muestras y otros diez con los compuestos. Además, las definiciones de los campos personalizados pueden importarse desde otro método existente.

Para definir nuevos campos personalizados

1 Seleccione la vista **Method and Run Control**.

2 Cargue el método necesario.

3 Seleccione **Método > Configuración de campos personalizados**.

   Se abre el cuadro de diálogo **Set up Custom Fields definitions**. Dicho cuadro de diálogo contiene dos secciones, una para los campos personalizados de muestras y otra para los de compuestos.

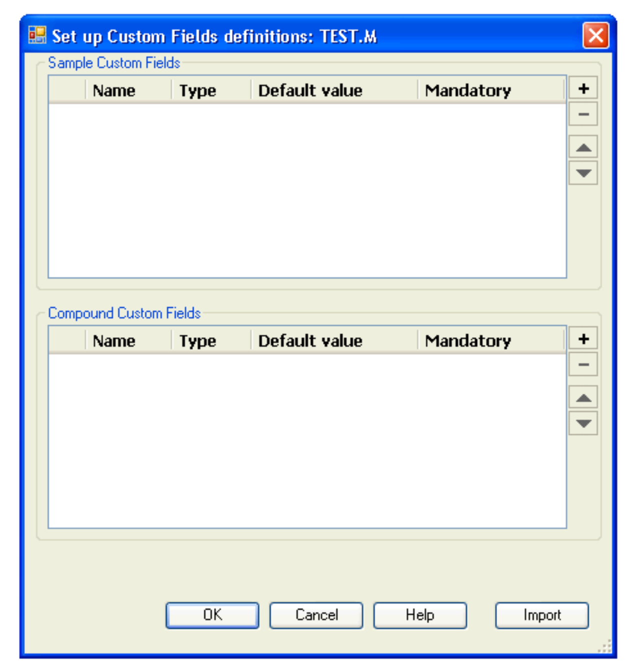


Figura 23 Cuadro de diálogo Configurar definiciones de campos personalizados

4. Haga clic en [+] para agregar un campo personalizado nuevo a la sección correspondiente.
5. Introduzca un nombre adecuado para el nuevo campo personalizado (por ejemplo, *Color*).

NOTA Si se crean campos personalizados de muestra denominados **Project** o **Study**, dichos campos aparecerán duplicados en el archivo .acaml: en la sección de campos personalizados normales y también en la asignación de proyectos o estudios. Esto permite al generador de informes de inteligencia de OpenLAB encontrar todos los resultados relacionados con un proyecto o estudio determinado.

6. Seleccione un tipo de datos adecuado (por ejemplo, *TEXTO*).
7. Si procede, introduzca un valor predeterminado (por ejemplo, *Azul*).
8. Si fuera apropiado, marque la casilla de verificación **Mandatory** para asegurarse de que siempre se rellene el campo personalizado.

   Si convierte el campo personalizado en obligatorio, también deberá proporcionar un valor predeterminado.

9 En caso necesario, haga clic en [−] para eliminar el campo personalizado seleccionado.

10 Del mismo modo, si es necesario, ajuste el orden de los campos personalizados con los botones *Arriba* [▲] y *Abajo* [▼].

Para importar campos personalizados desde un método existente

1 Asegúrese de que el método con los campos personalizados esté disponible en el sistema de archivos local.

2 Cargue el método de destino (en el que desee importar la definición de campos personalizados).

3 Seleccione **Method > Custom Fields Setup**.

4 Haga clic en **Import**. Se abrirá un cuadro de diálogo en el que se podrá seleccionar el método de origen desde el sistema de archivos local.

5 Haga clic en **OK**.

Especificación de valores de campos personalizados

Los valores específicos de los campos personalizados predefinidos dependen de la secuencia real. Por lo tanto, los valores se especifican en la tabla de secuencia.

Para proporcionar valores de campos personalizados de muestras

1 En la vista **Method and Run Control**, cargue la secuencia necesaria.

2 Para abrir la tabla de secuencia, seleccione **Sequence > Sequence Table**.

3 Haga clic en **Custom Fields**.

Se abre el cuadro de diálogo **Set up Custom Fields values**. La ficha **Sample Custom Fields** está activa. Cada campo personalizado predefinido aparece en una columna independiente. Los campos personalizados obligatorios están marcados con un (*) delante del nombre del campo.

Las líneas corresponden a las líneas de la tabla de secuencia.

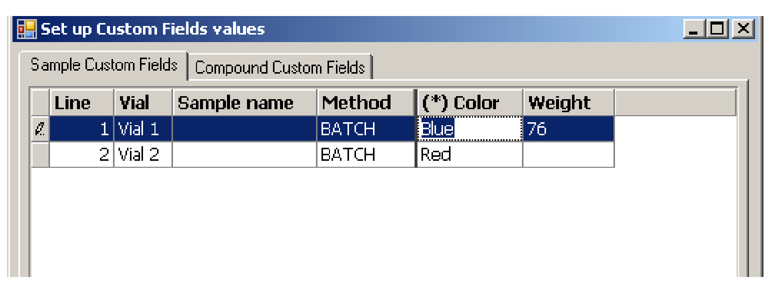


Figura 24 Configurar valores de campos personalizados - Campos personalizados de muestras

4 Introduzca los valores necesarios para cada muestra y campo personalizado.

NOTA Sólo se podrá iniciar una secuencia cuando se hayan rellenado todos los campos obligatorios.

Para proporcionar valores de campos personalizados de compuestos:

1 Seleccione la ficha **Compound Custom Fields**.

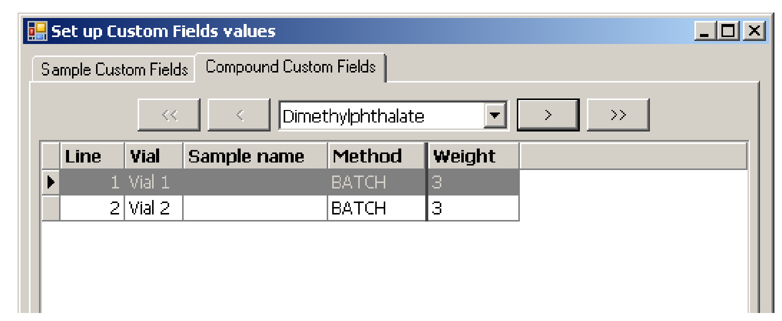


Figura 25 Configurar valores de campos personalizados - Campos personalizados de compuesto

NOTA Esta ficha sólo está disponible si ha configurado los compuestos en la tabla de calibración del método.

2 Seleccione el compuesto necesario en la lista desplegable de la parte inferior o haga clic en <<, <, > o >> para desplazarse hasta el campo necesario.

3 Introduzca los valores necesarios para cada muestra y campo personalizado.

4 Seleccione el resto de compuestos e indique los valores que correspondan.

5 Haga clic en **OK**.

Elaboración de informes de campos personalizados

Los valores de los campos personalizados siempre se guardan en ECM y, por lo tanto, siempre están disponibles en el generador de informes de inteligencia de OpenLAB. Sin embargo, no aparecen automáticamente en los informes de ChemStation. Si quiere que los campos personalizados se muestren en los informes de ChemStation, debe ajustar en primer lugar las opciones de los informes.

Para mostrar campos personalizados en informes de ChemStation

1 Seleccione la vista **Data Analysis**.

2 Seleccione **Report > Specify Report**.

3 Marque las casillas de verificación **Add Sample Custom fields to Sample info**y **Add Compound Custom fields**.

4 Haga clic en **OK**.

   Los campos personalizados y los valores respectivos aparecerán ahora en los informes de ChemStation (ver ejemplos a continuación).

```
Data File C:\CHEM32\1\DATA\TEST 2008-04-07 16-09-40\002-0201.D

    ===================================================================
    Acq. Operator   :                                  Seq. Line :   2
    Acq. Instrument : Instrument 1                      Location : Vial 2
    Injection Date  : 4/7/2008 4:12:16 PM                    Inj :   1
                                                      Inj Volume : 5 µl
    Sequence File   : C:\Chem32\1\DATA\TEST 2008-04-07 16-09-40\TEST.S
    Method          : C:\Chem32\1\DATA\TEST 2008-04-07 16-09-40\BATCH.M
    Last changed    : 4/7/2008 4:09:19 PM

    Sample-related custom fields:

    Name                          |Value
    ------------------------------|------------------------------------
    Color                          Red
    Weight
```

Figura 26 Campos personalizados de muestras

```
     3   2.568         0.0000    0.00000    0.0000 Biphenyl
     4   5.846         0.0000    0.00000    0.0000 o-Terphenyl

  Totals :                       0.00000


  1 Warnings or Errors :

  Warning : Calibrated compound(s) not found

  =====================================================================

  Compound-related custom fields:

  Corr. Exp. RT [min]:0.747021   Dimethylphthalate
  ---------------------------------------------------------------------
  Name                          |Value
  ------------------------------|--------------------------------------
  Weight                         3

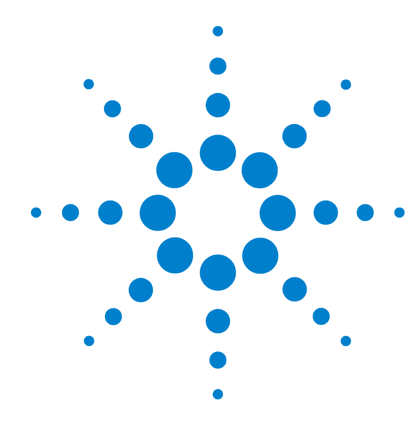
  Corr. Exp. RT [min]:1.021871   Diethylphthalate
  ---------------------------------------------------------------------
  Name                          |Value
  ------------------------------|--------------------------------------
```

Figura 27 Campos personalizados de compuestos

Reprocesamiento con campos personalizados

Durante el reprocesamiento se puede modificar el valor de los campos personalizados. Al preparar el reprocesamiento, es posible editar los valores de los campos personalizados en la Tabla de secuencia de la vista *Análisis de datos*. Para obtener más información sobre la edición de los valores de los campos personalizados, consulte “Especificación de valores de campos personalizados” en la página 110.

Después de la adquisición, sólo se pueden editar los valores de los campos personalizados existentes, es decir, los campos personalizados que se definieron en el método utilizado para la adquisición. No es posible agregar campos personalizados con posterioridad, incluso aunque el método utilizado para el reprocesamiento contenga campos personalizados diferentes de los del método original.



7
Tratamiento de datos heredados de ChemStation y de la migración de datos desde ChemStore

Introducción 116
Migración del contenedor de secuencias 117
Conversión de los datos migrados desde ChemStore 119

En este capítulo se proporciona información sobre la migración de datos de secuencias heredados de ChemStation a formato de contenedor de secuencias con el fin de que sea posible la carga de estos conjuntos de datos en ECM.

Introducción

Con la opción ChemStation OpenLAB instalada, no es posible la desactivación de la opción **Unique Folder Creation**. Todos los conjuntos de datos de secuencias adquiridos se almacenan por lo tanto en forma de contenedor de secuencias. Consulte el manual *"Primeros pasos con el flujo de trabajo de la nueva ChemStation"* para obtener más detalles sobre el trabajo con la opción **Unique Folder Creation**.

El formato de contenedor de secuencias es esencial para la carga de secuencias en ECM. De manera que deberá realizarse la migración de los datos de secuencias heredados de ChemStation adquiridos con versiones de ChemStation anteriores a la versión B.02.01, o con la opción **Unique Folder Creation** desactivada, a formato de contenedor de secuencias antes de su carga en ECM.

También es posible realizar la conversión de los datos heredados de ChemStore migrados a ECM para su revisión en la tabla de navegación.

Migración del contenedor de secuencias

ChemStation dispone de una herramienta que permite realizar la migración de datos que no tienen formado de contenedor al formato de contenedor de secuencias. Para efectuar correctamente esta tarea es necesario que el archivo de secuencias original siga estando disponible. Este archivo debe incluir todas las líneas de secuencias necesarias y seguir el esquema de denominación del archivo de datos original para que sea posible el reprocesamiento de todos los archivos de datos de la secuencia. Además, tienen que estar disponibles todos los métodos de la columna Método de la tabla de secuencias.

Para llevar a cabo la migración:

inicie la **Sequence Container Migration** en el menú **Sequence** de la vista **Data Analysis**.

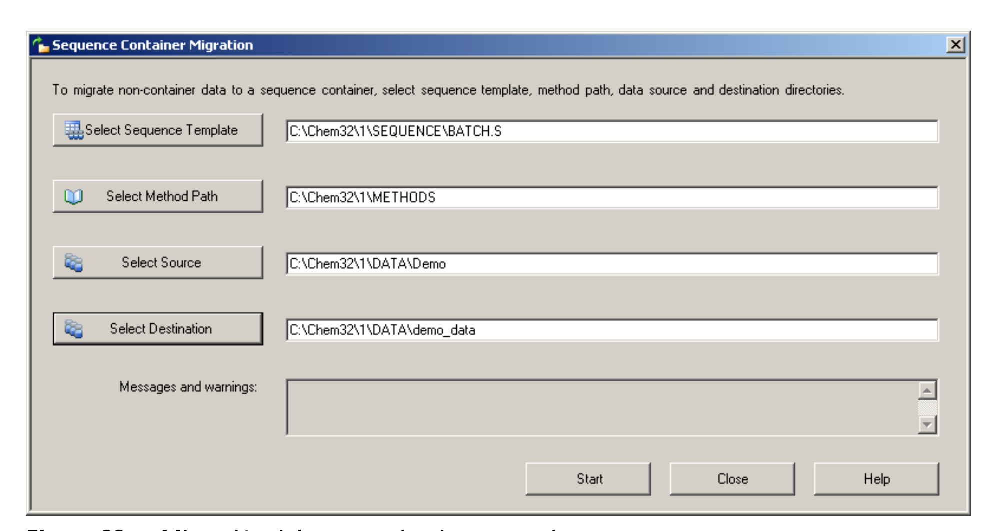


Figura 28 Migración del contenedor de secuencias

Rellene los siguientes campos obligatorios (consulte Figura 28 en la página 117):

Select Sequence Template: seleccione el archivo de secuencias .S que contenga la tabla de secuencias que coincida con el conjunto de datos objeto de migración.

Select Method Patch: seleccione el directorio en el que se encuentran los métodos y al que se hace referencia en la tabla de secuencias.

Select Source: seleccione el directorio que contiene los archivos de datos objeto de migración.

Select Destination: especifique la ruta y el nombre del contenedor de secuencias que se va a crear. Es posible seleccionar una carpeta existente o crear una nueva.

Una vez que se hayan rellenado todos los datos, podrá iniciarse la migración.

Se realizarán los pasos siguientes:

- Se creará el directorio del contenedor de secuencias.
- Se copiará la plantilla de secuencias en el contenedor. Además, se convertirá a un estado en el que es posible el reprocesamiento de archivos de datos en la vista **Data Analysis**.
- Los métodos a los que se hace referencia en la tabla de secuencias se copian de la ruta de métodos especificada a la carpeta del contenedor.
- Se copian los archivos de datos, el libro de registro de secuencias y el fichero de lotes del directorio de origen de los datos al directorio de destino.
- De acuerdo con la información que contiene la tabla de secuencias, se copiará una copia del método correspondiente en cada archivo de datos como DA.M.

Una vez finalizada la migración al contenedor, aparecerá un mensaje que indica que el proceso se ha realizado correctamente en el campo **Messages and Warnings**. De lo contrario, un mensaje de aviso indicará que se ha producido algún problema durante la migración. Podrá obtener más detalles sobre el aviso haciendo doble clic en el mensaje de aviso.

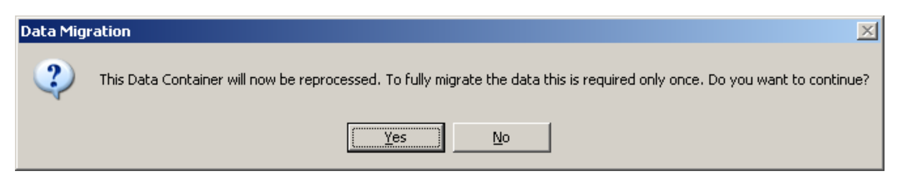
Conversión de los datos migrados desde ChemStore

Una vez realizada la migración de los datos de secuencias de ChemStore a ECM, estos ya estarán disponibles en forma de archivos .sc.ssizip y, por lo tanto, estarán listos para su descarga en la vista Análisis de datos de ChemStation. Sin embargo, es necesario realizar la conversión de estos contenedores de secuencias para que sea posible su revisión en la tabla de navegación.

El proceso de conversión se inicia automáticamente tras la descarga de los datos desde ECM:

1 Seleccione **ECM > Cargar datos** y seleccione el conjunto de datos que desea ver en ChemStation.

   Mediante un mensaje, se le indica que los datos de secuencias van a ser reprocesados. Pulse **Yes** para continuar.



NOTA Si pulsa **No**, se eliminará de forma inmediata la copia local del conjunto de datos.

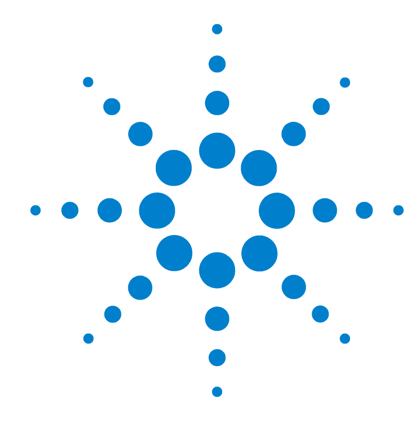
2 Cuando se le pida si desea guardar el archivo de secuencias, pulse **Yes**.

   Para evitar la impresión de informes en el paso de reprocesamiento para la conversión, los ajustes del **Sequence Output** de la secuencia se cambian del modo siguiente:

   - **Print sequence summary report**: activado
   - **Report to printer**: desactivado
   - **Report to file**: desactivado
   - **Report to PDF**: desactivado
   - **Report to HTM**: desactivado
   - **Print individual report for each run as well**: desactivado

3 Ahora podrá revisar o reprocesar los datos de secuencias.

Si el contenedor de secuencias se carga en ECM tras la conversión (ya sea de forma automática o manual después del reprocesamiento), las nuevas versiones de la secuencia podrán cargarse en ChemStation sin que sea necesario realizar más pasos de conversión más adelante.



8
Interfase para el generador de informes de inteligencia de OpenLAB

Introducción 122

Requisitos previos 124

Flujos de trabajo de generación de informes típicos 124

Para crear un informe de resumen de OpenLAB de secuencia individual 129

Interfase de componentes relacionados con OpenLAB IR 130

Selección de plantilla en Resultado de secuencia 130

Creación automática de OpenLAB Intelligence Report al final de la secuencia 131

Comandos de OpenLAB IR en el menú de ECM 131

Cálculo de valores de rendimiento 132

En este capítulo se proporciona información sobre la integración del generador de informes de inteligencia de OpenLAB en Agilent ChemStation.

Introducción

El generador de informes de inteligencia de OpenLAB proporciona funciones avanzadas de generación de informes para cualquier dato cromatográfico creado con Agilent ChemStation o Agilent OpenLAB ICM. Los informes se basan en los datos ACAML 1.1 o 1.2 estandarizados que ChemStation (B.02.01.SR1 o superior con la opción ChemStation OpenLAB) genera automáticamente.

El generador de informes de inteligencia de OpenLAB permite generar conocimiento mediante la creación de diferentes tipos de informes de inteligencia:

- informes de secuencia con resumen de cálculos y estadísticas
- Informes de pruebas complejas con información condensada, por ejemplo, mediante la visualización de resultados clave o la presentación de gráficos de tendencias
- Informes que muestran los resultados basados en decisiones (por ejemplo, con los valores atípicos marcados o con los resultados ordenados automáticamente mediante criterios de aprobación/error)

El generador de informes de inteligencia de OpenLAB se puede utilizar tanto para informar de los resultados actuales que aparecen en ChemStation como para definir los datos necesarios en el cliente del generador de informes.

NOTA Para obtener más información acerca del generador de informes de inteligencia de OpenLAB, consulte su documentación relacionada.

Versión ACAML

ChemStation almacena los datos en formato ACAML (ACAML = Agilent Common Analytical Markup Language (Lenguaje de marcación analítica común de Agilent)), que genera archivos .acaml. Cada secuencia o análisis individual incluye un archivo .acaml. Al cargar los datos en ECM, el archivo .acaml forma parte del contenedor de secuencias SSIZIP. El generador de informes de inteligencia de OpenLAB utiliza los datos proporcionados en estos archivos .acaml.

En ChemStation B.04.02, el esquema de ACAML se ha actualizado de la versión 1.1 a la 1.2. La versión 1.2 del esquema de ACAML sólo es compatible con la revisión A.02.01 del generador de informes de inteligencia de OpenLAB.

Flujo de datos: ejemplo

Al utilizar ChemStation con ECM y el generador de informes de inteligencia de OpenLAB, los datos se transfieren a diferentes horas desde el cliente de ChemStation al servidor de ECM y viceversa. Hay diversos escenarios posibles de flujos de datos, que dependen del flujo de trabajo que se esté siguiendo.

Como ejemplo, la imagen siguiente muestra el flujo de datos para la creación de un informe de secuencia individual.

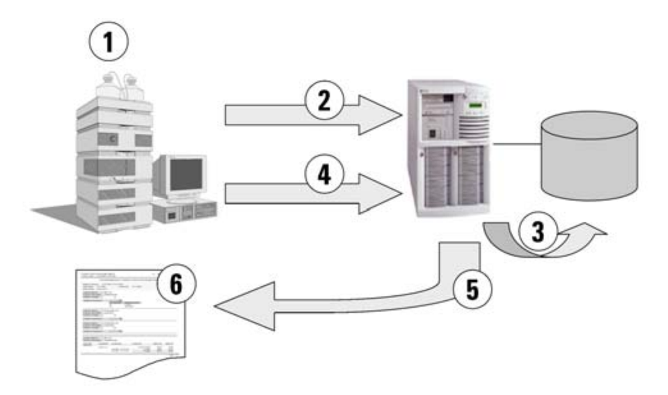


Figura 29 Ejemplo: flujo de datos para la creación de un informe de secuencia única

1 En ChemStation:
   - Seleccione una plantilla de informe para el generador de informes de inteligencia de OpenLAB en el Resultado de secuencias.
   - Si el informe va a crearse automáticamente al final de la secuencia, seleccione **Preview at end of sequence** en el Resultado de secuencias.
   - Seleccione el parámetro de transferencia automática de datos **After Acquisition**.
   - Inicie la secuencia.
2 Al finalizar la adquisición, todos los datos se transfieren automáticamente a ECM.
3 Los datos y metadatos de resultados se extraen automáticamente de los archivos .acaml a la base de datos de generación de informes.
4 En ChemStation: inicie la creación del informe haciendo clic en **Create OpenLAB Intelligence Report**. Si se seleccionó la opción **Preview at end of sequence** en el Resultado de secuencias, se creará el informe automáticamente sin interacción adicional por parte del usuario.

5 La plantilla de informe seleccionada anteriormente se aplica de forma automática a los nuevos datos de secuencia. El informe resultante se transfiere al ordenador cliente de ChemStation.

6 El informe de OpenLAB IR resultante se muestra en ChemStation.

Requisitos previos

Si desea utilizar el generador de informes de inteligencia de OpenLAB, deben cumplirse los siguientes requisitos previos:

- Que OpenLAB ECM esté instalado.
- Que el generador de informes de inteligencia de OpenLAB esté instalado.
- Que la opción ChemStation OpenLAB esté instalada.
- Que los datos cromatográficos se hayan cargado en ECM.

Flujos de trabajo de generación de informes típicos

Según las condiciones, existen diferentes flujos de trabajo al trabajar con el generador de informes de inteligencia de OpenLAB. Normalmente, se aplica uno de los siguientes flujos:

- **Single Sequence OpenLAB Summary Report** (consulte “Para crear un informe de resumen de OpenLAB de secuencia individual” en la página 129)

  Se adquiere una única secuencia en ChemStation y los datos se revisan allí en primer lugar. El informe de resumen de OpenLAB se crea sólo para está única secuencia.

- **Multiple Sequence Summary Report**

  Se adquieren varias secuencias con el tiempo (de días a semanas). Posteriormente, un usuario busca estas secuencias y crea un informe de resumen de la secuencias seleccionadas.

- **Study/Project Summary Report**

  Se adquiere un gran número de secuencias (de decenas a centenas) con el tiempo (de semanas a meses). Un usuario busca *todos* los datos de esas secuencias y crea un informe de resumen de estudio complejo basado en dichos datos.

NOTA

Únicamente puede generarse directamente desde ChemStation el *Informe de resumen de secuencia individual*. Para los otros dos flujos de trabajo de generación de informes es necesario realizar todas las tareas en el generador de informes de inteligencia de OpenLAB. Consulte la documentación del generador de informes de inteligencia de OpenLAB para obtener más información.

NOTA

Al imprimir un *Informe de inteligencia* directamente en la ChemStation solamente se crea un informe basado en la última versión de los datos. Para obtener informes basados en versiones anteriores se debe modificar la plantilla de informe o bien se debe crear el informe en el software del generador de informes de inteligencia de OpenLAB.

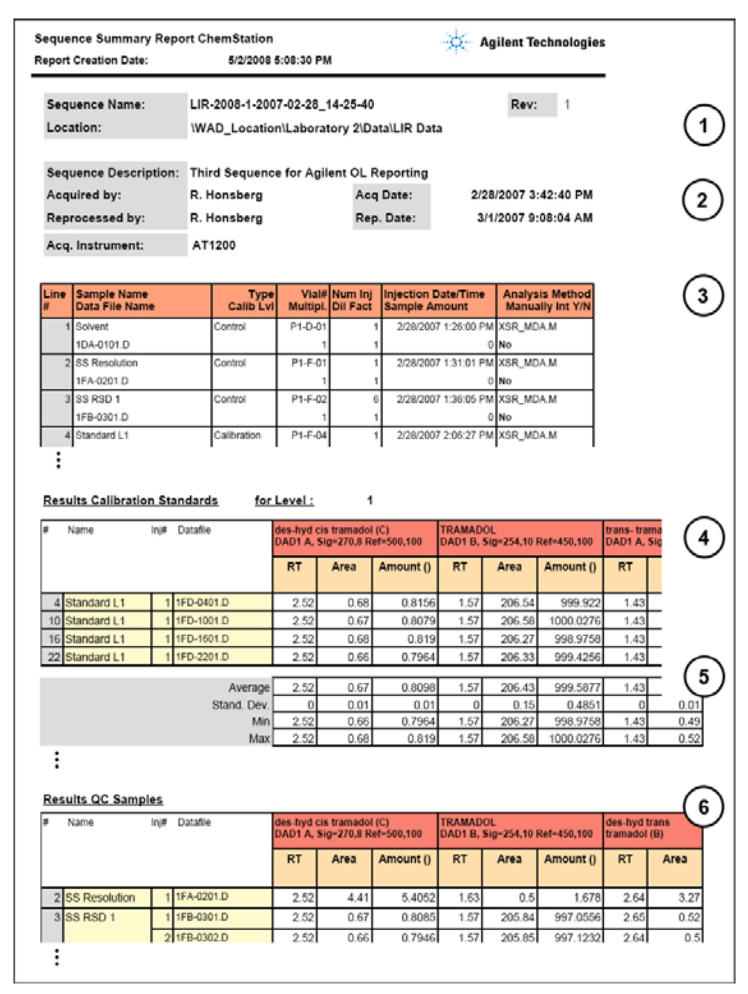
Informes de ejemplo

Los informes generados con el generador de informes de inteligencia de OpenLAB pueden incluir una amplia variedad de información como:

- Cálculos personalizados (p. ej., cálculos de resumen, estadísticas y pruebas complejas)
- Presentación de resultados en base a decisiones (marcar valores atípicos, ordenar resultados de forma automática mediante criterios de aprobación/error, etc)
- Selección de contenido de informes en base a una búsqueda
- Condensar la información visualizando resultados clave (p. ej., en gráficos de tendencia)

Además, los informes interactivos pueden basarse en parámetros específicos como, por ejemplo, intervalo de fechas, o bien, incluir información detallada expandible.

Consulte las siguientes figuras a modo de ejemplo.



Sequence Summary Report ChemStation
Report Creation Date: 5/2/2008 5:08:30 PM

Agilent Technologies

Sequence Name:	LIR-2008-1-2007-02-28_14-25-40	Rev:	1
Location:	\WAD_Location\Laboratory 2\Data\LIR Data		

Sequence Description:	Third Sequence for Agilent OL Reporting		
Acquired by:	R. Honsberg	Acq Date:	2/28/2007 3:42:40 PM
Reprocessed by:	R. Honsberg	Rep. Date:	3/1/2007 9:08:04 AM
Acq. Instrument:	AT1200		

Line #	Sample Name Data File Name	Type Calib Lvl	Vial# Multipl.	Num Inj Dil Fact	Injection Date/Time Sample Amount	Analysis Method Manually Int Y/N
1	Solvent	Control	P1-D-01	1	2/28/2007 1:26:00 PM	XSR_MDA.M
	1DA-0101.D		1	1	0	No
2	SS Resolution	Control	P1-F-01	1	2/28/2007 1:31:01 PM	XSR_MDA.M
	1FA-0201.D		1	1	0	No
3	SS RSD 1	Control	P1-F-02	6	2/28/2007 1:36:05 PM	XSR_MDA.M
	1FB-0301.D		1	1	0	No
4	Standard L1	Calibration	P1-F-04	1	2/28/2007 2:06:27 PM	XSR_MDA.M

⋮

Results Calibration Standards for Level : 1

#	Name	Inj#	Datafile	des-hyd cis tramadol (C) DAD1 A, Sig=270,8 Ref=500,100			TRAMADOL DAD1 B, Sig=254,10 Ref=450,100			trans- trama DAD1 A, Sig	
				RT	Area	Amount ()	RT	Area	Amount ()	RT	
4	Standard L1	1	1FD-0401.D	2.52	0.68	0.8156	1.57	206.54	999.922	1.43	
10	Standard L1	1	1FD-1001.D	2.52	0.67	0.8079	1.57	206.58	1000.0276	1.43	
16	Standard L1	1	1FD-1601.D	2.52	0.68	0.819	1.57	206.27	998.9758	1.43	
22	Standard L1	1	1FD-2201.D	2.52	0.66	0.7964	1.57	206.33	999.4256	1.43	
			Average	2.52	0.67	0.8098	1.57	206.43	999.5877	1.43	
			Stand. Dev.	0	0.01	0.01	0	0.15	0.4851	0	0.01
			Min	2.52	0.66	0.7964	1.57	206.27	998.9758	1.43	0.49
			Max	2.52	0.68	0.819	1.57	206.58	1000.0276	1.43	0.52

⋮

Results QC Samples

#	Name	Inj#	Datafile	des-hyd cis tramadol (C) DAD1 A, Sig=270,8 Ref=500,100			TRAMADOL DAD1 B, Sig=254,10 Ref=450,100			des-hyd trans tramadol (B)	
				RT	Area	Amount ()	RT	Area	Amount ()	RT	Area
2	SS Resolution	1	1FA-0201.D	2.52	4.41	5.4052	1.63	0.5	1.678	2.64	3.27
3	SS RSD 1	1	1FB-0301.D	2.52	0.67	0.8085	1.57	205.84	997.0556	2.65	0.52
		2	1FB-0302.D	2.52	0.66	0.7946	1.57	205.85	997.1232	2.64	0.5

⋮

Figura 30 Informe de resumen de varias secuencias

(1) Cabecera de informe con el logotipo de la empresa

(2) Información de la secuencia

(3) Tabla de la secuencia

(4) Resultados de los estándares de calibración

(5) Cálculos estadísticos

(6) Resultados para muestras de control de calidad agrupados por el nombre de la muestra

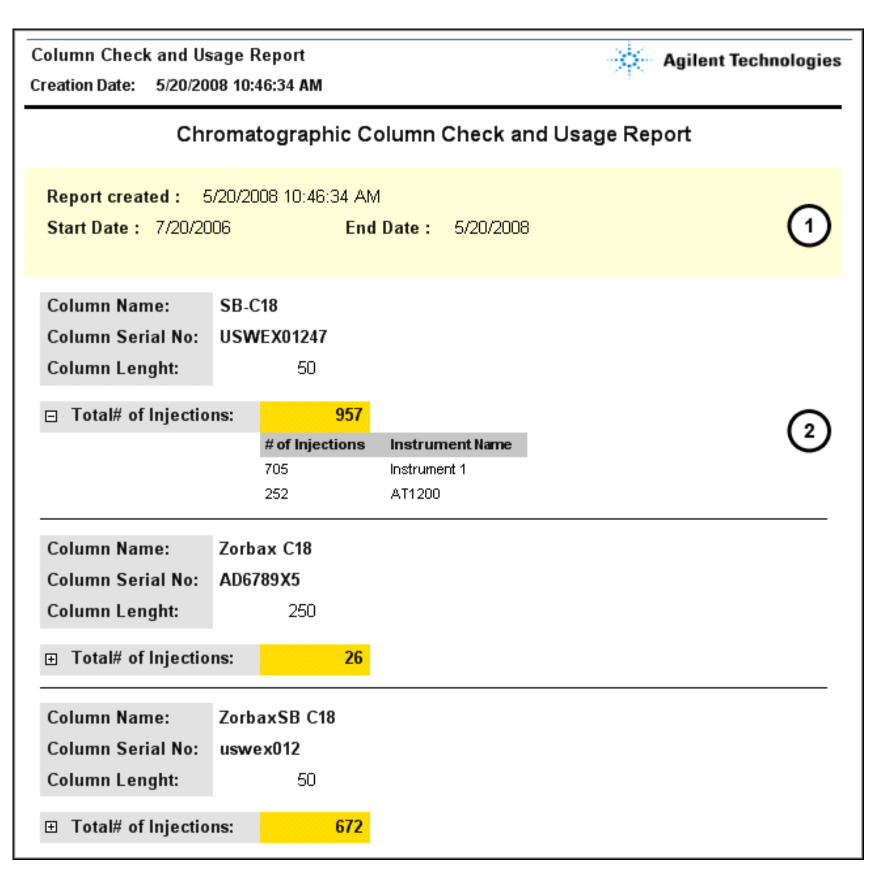
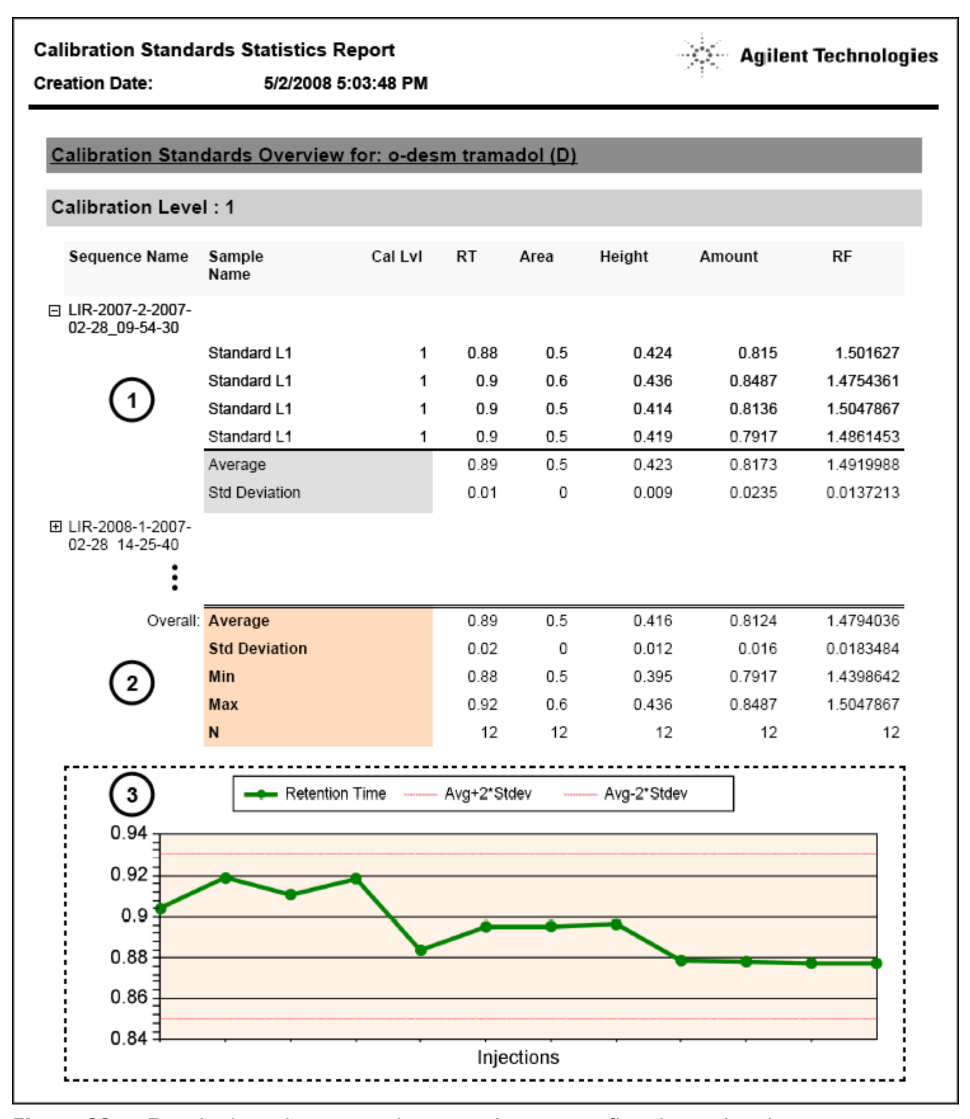


Figura 31 Informe de uso de columna interactivo

(1) Parámetros del usuario (aquí: **Start Date** y **End Date**) tal como los ha seleccionado el usuario

(2) Información detallada expandible



Calibration Standards Statistics Report

Creation Date: 5/2/2008 5:03:48 PM

Agilent Technologies

Calibration Standards Overview for: o-desm tramadol (D)

Calibration Level : 1

Sequence Name	Sample Name	Cal Lvl	RT	Area	Height	Amount	RF
⊟ LIR-2007-2-2007-02-28_09-54-30							
	Standard L1	1	0.88	0.5	0.424	0.815	1.501627
(1)	Standard L1	1	0.9	0.6	0.436	0.8487	1.4754361
	Standard L1	1	0.9	0.5	0.414	0.8136	1.5047867
	Standard L1	1	0.9	0.5	0.419	0.7917	1.4861453
	Average		0.89	0.5	0.423	0.8173	1.4919988
	Std Deviation		0.01	0	0.009	0.0235	0.0137213
⊞ LIR-2008-1-2007-02-28_14-25-40							
⋮							
Overall:	**Average**		0.89	0.5	0.416	0.8124	1.4794036
	Std Deviation		0.02	0	0.012	0.016	0.0183484
(2)	**Min**		0.88	0.5	0.395	0.7917	1.4398642
	Max		0.92	0.6	0.436	0.8487	1.5047867
	N		12	12	12	12	12

Figura 32 Estadísticas de secuencias cruzadas con gráfico de tendencia

(1) Información detallada expandible de cada secuencia

(2) Estadísticas globales

(3) Gráfico de tendencia

Para crear un informe de resumen de OpenLAB de secuencia individual

1 Prepare los datos en ChemStation. Hay dos métodos diferentes para preparar los datos (consulte “Flujos de trabajo relacionados con los datos” en la página 61). Por ejemplo, analice una secuencia con el parámetro de transferencia **After Acquisition.**

NOTA Asegúrese de que los datos se hayan cargado en ECM.

2 En la vista **Data Analysis**, cargue el conjunto de datos correspondiente.

3 En **Sequence > Sequence Output**, seleccione una plantilla de OpenLAB IR adecuada.

4 Seleccione **ECM > Create OpenLAB Intelligence Report**.

Se abre el informe de OpenLAB IR resultante con los datos de la secuencia actual.

Interfase de componentes relacionados con OpenLAB IR

Si está instalado el generador de informes de inteligencia de OpenLAB, ChemStation incluirá varios componentes de interfase nuevos. A continuación, se describen dichos componentes.

Selección de plantilla en Resultado de secuencia

Desde **Sequence > Sequence Output**, se puede seleccionar una**OpenLAB Intelligence Report Template** para la secuencia cargada en ese momento. Este parámetro es opcional.

- Si se selecciona una plantilla de informe específica:

  Al crear un informe, el generador de informes de inteligencia de OpenLAB utilizará automáticamente dicha plantilla. El informe resultante se mostrará en el generador de informes de inteligencia de OpenLAB sin ninguna otra pregunta.

- Si no se selecciona ninguna plantilla de informe específica:

  Al crear un informe, el generador de informes de inteligencia de OpenLAB lo abre con los datos relevantes que ya están seleccionados, pero sin aplicar ninguna plantilla de informe específica a los datos. Habrá que abrir manualmente una plantilla de informe adecuada desde el cliente del generador de informes de OpenLAB IR.

NOTA

En una instalación de ECM con varias cuentas, los proyectos de *todas* las cuentas pueden verse en el menú **Projects** del generador de informes de inteligencia de OpenLAB. Asegúrese de seleccionar un proyecto que pertenezca a la cuenta de ECM en la que esté trabajando.

Esto no supone un problema al seleccionar una plantilla directamente desde ChemStation, ya que la plantilla se selecciona desde la estructura LCDF de la cuenta de ECM específica en la que está trabajando.

Dependiendo de las opciones seleccionadas en el cliente del generador de informes de OpenLAB IR, el informe se generará automáticamente después de cargar la plantilla o bien deberá generarse manualmente.

El enlace a la plantilla de informe seleccionada se guarda en los parámetros de la secuencia. De ese modo, la próxima vez que se cree el informe, se aplicará la plantilla automáticamente.

Es posible seleccionar en cualquier momento una plantilla de informe diferente en el generador de informes de inteligencia de OpenLAB. El parámetro del Resultado de secuencia de ChemStation sólo se utiliza como valor predeterminado.

Creación automática de OpenLAB Intelligence Report al final de la secuencia

Desde **Sequence > Sequence Output**, se puede seleccionar **Preview at end of sequence** para la plantilla de secuencias cargada en ese momento. Este parámetro es opcional. Es necesario que se haya seleccionado también una plantilla de OpenLAB Intelligence Report.

Con esta configuración habilitada, se creará automáticamente un informe de inteligencia de OpenLAB automáticamente al final de la adquisición de la secuencia o el reprocesamiento de la secuencia en función de la plantilla seleccionada.

Comandos de OpenLAB IR en el menú de ECM

En el menú de **ECM**, hay dos comandos relacionados con el generador de informes de inteligencia de OpenLAB:

- **Iniciar OpenLAB IR**

  Con este comando se abre el generador de informes de inteligencia de OpenLAB. No se traspasa ningún dato de ChemStation al cliente del generador de informes. Los datos necesarios pueden seleccionarse directamente en el cliente del generador de informes.

- **Crear informe de OpenLAB IR**

Una vez realizada la adquisición o el reprocesamiento de los datos de la secuencia, en cuanto los datos se hayan cargado en ECM se podrá crear un informe en el generador de informes de inteligencia de OpenLAB. El informe se basa específicamente en la secuencia actual, es decir, la secuencia cargada en ese momento en la vista **Data Analysis** de ChemStation.

NOTA Antes de crear el informe, es necesario cargar primero los datos de secuencia en ECM. Para generar un informe, el generador de informes de inteligencia de OpenLAB sólo puede utilizar los datos disponibles en ECM.

Cálculo de valores de rendimiento

En ChemStation, determinados valores específicos como, por ejemplo, valores de *ruido* y de *rendimiento de pico*, no se calculan ni se cargan necesariamente en ECM. Si dichos valores no se cargan en ECM, no podrán utilizarse en los informes.

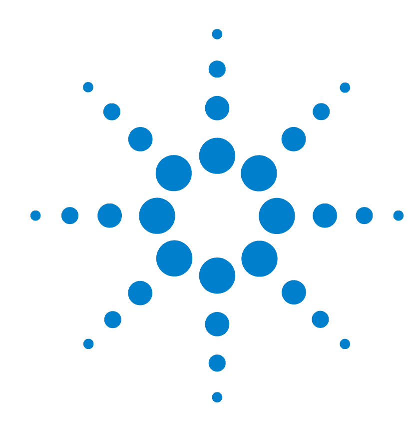
En **ECM > Preferencias**, se encuentra la casilla de verificación **Calculate Peak Performance**. Por defecto, esta casilla no está marcada.

- Si se selecciona **Calculate Peak Performance**:

  Los valores como, por ejemplo, *ruido* y *rendimiento del pico* se calculan siempre. Dichos valores se cargan en ECM junto con el resto de los datos de la secuencia. Podrá utilizar los valores en los informes.

- Si no se selecciona **Calculate Peak Performance**

  Los valores como, por ejemplo *ruido* y *rendimiento del pico* sólo se calculan si se eligen los estilos de informe de ChemStation **Performance** o **Extended Performance**. Como consecuencia, no hay garantía de que dichos valores estén siempre en ECM y no se podrán generar informes de OpenLAB IR fiables que contengan este tipo de información.



9
Servicios de extracción de atributos de datos de ChemStation

Servicios de extracción de atributos de datos de ChemStation 134
Filtro ACAML 137
Servicio de extracción de atributos XML de ChemStation 138
Filtro de ChemStation 139

En este capítulo se describen los servicios de extracción de atributos de ECM (AES) para datos de ChemStation. El AES extrae información de metadatos de los archivos de datos de ChemStation. Estos metadatos permiten la búsqueda de los datos de ChemStation. Para obtener más información, consulte la documentación de ECM.

Servicios de extracción de atributos de datos de ChemStation

Servicios de extracción de atributos (AES) de ECM proporciona los siguientes AES para la extracción de metadatos de archivos de datos de ChemStation:

- El filtro *XML de ChemStation* extrae los datos de pico, compuestos y resultados del archivo result.xml generado con la rutina de exportación XML en ChemStation revisión A.10.02 y posterior.
- El filtro de *ChemStation* extrae datos de análisis y muestras básicos de la cabecera de los archivos de canal (*.ch) y de los archivos *.uv y *.txt generados por todas las revisiones de ChemStation.

Un AES debe instalarlo un administrador de ECM en el servidor de ECM; además, es necesario habilitar los filtros para el sistema. Es necesario seleccionar las claves de un AES que deben aplicarse a un archivo de ChemStation para la correspondiente estructura LCDF. Se trata de tareas de administración de ECM y se describen en la Guía del administrador del Gestor de contenidos empresariales y en la ayuda en línea de ECM.

Los metadatos pueden consultarse mediante diversos tipos de búsqueda de ECM. La función Búsqueda en ECM también está disponible en ChemStation. Al abrir un archivo desde ECM, el cuadro de diálogo **ECM Open** permite buscar archivos de interés con el icono de una lupa (consulte Figura 33 en la página 135).

Al utilizar la Búsqueda rápida, se puede realizar una búsqueda a través de varios campos alfanuméricos introduciendo una clave de búsqueda como, por ejemplo, un nombre de operador. En la página de búsqueda siguiente, seleccione la ficha **Advanced** donde, dependiendo de los paquetes de filtro que estén activados, habrá varias claves habilitadas (consulte Figura 34 en la página 135).

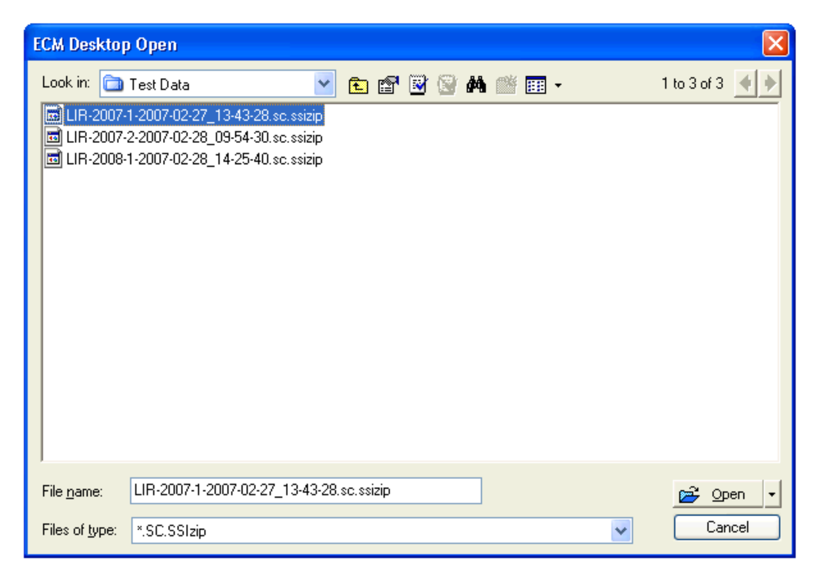


Figura 33 Opciones de búsqueda

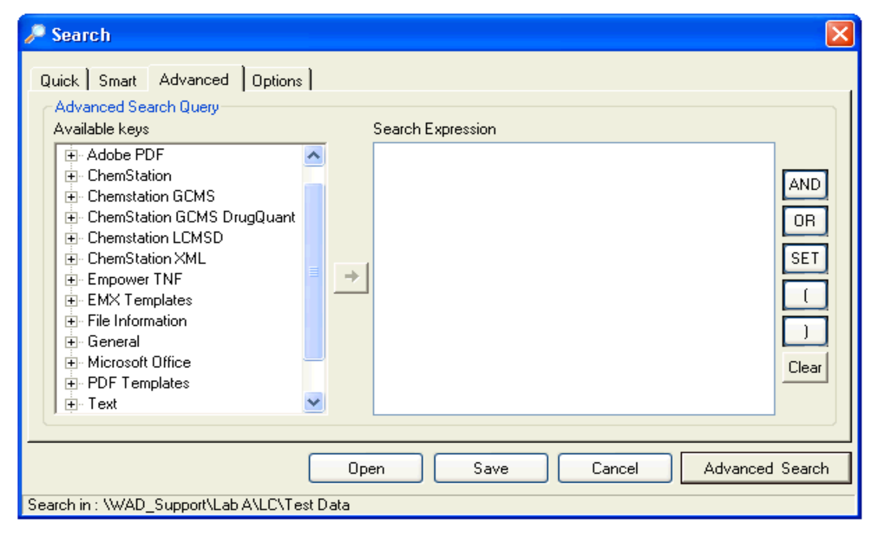


Figura 34 Filtros disponibles en opciones de búsqueda

En el cuadro de diálogo **Search**, es posible especificar las claves disponibles y definir una expresión de búsqueda combinando dos o más claves mediante operadores booleanos. Para obtener más información acerca del uso de dife-

rentes algoritmos de búsqueda, consulte la ayuda en línea del sistema ECM o la Guía del administrador del Gestor de contenidos empresariales, así como los manuales relacionados con AES.

Filtro ACAML

El filtro ACAML extrae información de los archivos ACAML que también se utilizan para el generador de informes de inteligencia de OpenLAB (consulte “Interfase para el generador de informes de inteligencia de OpenLAB” en la página 121). Los archivos ACAML siempre se crean al adquirir o reprocesar datos cuando la opción OpenLAB está instalada.

Tenga en cuenta que el filtro ACAML solamente está disponible para ECM 3.3.2 SP1.

Servicio de extracción de atributos XML de ChemStation

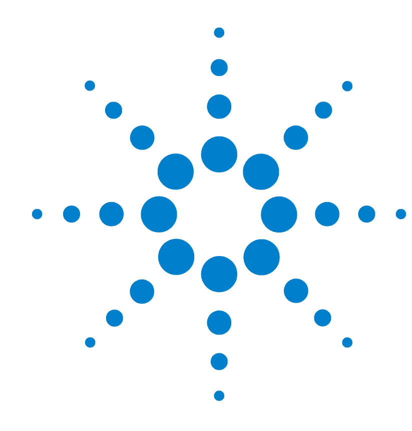
El AES para XML de ChemStation extrae información clave de las siguientes categorías del archivo result.xml generado con ChemStation Rev. A (revisión A.10.02 y posterior) y ChemStation Rev. B (revisión B.01.01.y posterior) por archivo de datos. Tenga en cuenta que ChemStation debe estar configurado para generar el archivo result.xml (consulte la Guía de conectividad XML de ChemStation).

- Adquisición (por ejemplo, nombre del instrumento, información del método)
- Cromatograma (por ejemplo, orden derivada, nombre del detector)
- Personalizada
- Módulo
- Picos (por ejemplo, nombre del pico, cantidad, tiempo de retención, nombre del compuesto)
- Muestra (por ejemplo, método de calibración, Id. de LIMS)
- Señal/ruido

Filtro de ChemStation

El AES para ChemStation extrae atributos de archivos *.ch, *.uv y *.txt creados con ChemStation 16 bits (Rev A.x.x) o con ChemStation 32 bits (Rev B.x.x). Extrae información clave de la cabecera de los archivos de datos *.ch y *.uv de ChemStation ((por ejemplo, nombre de la muestra, archivo de método, modelo del instrumento). Desde el archivo report.txt, extrae información clave (por ejemplo, nombre de la muestra, método de adquisición, método de análisis). Además, el servicio extrae información sobre los archivos de soporte desde la categoría Contenido.

Un complemento programador de ECM para Agilent ChemStation permite que el programador de ECM cargue automáticamente en ECM los datos generados con ChemStation.



10
Uso de servicios de impresión en ChemStation

Servicios de impresión de ECM 142

Configuración de Servicios de impresión de ECM 143

Instalación de Servicios de impresión de ECM 143

Configuración de Servicios de impresión de ECM para usarlos con Amyuni PDF Converter 144

Para establecer la impresora en el "modo desatendido" 145

Configuración de Servicios de impresión de ECM - Adobe Distiller 146

Para establecer la impresora en el "modo desatendido" 147

Trabajar con Servicios de impresión de ECM en ChemStation 148

En este capítulo se describe de forma breve cómo instalar y configurar los servicios de impresión. Dicho servicio permite cargar automáticamente los informes de ChemStation en ECM en formato PDF.

Servicios de impresión de ECM

Los Servicios de impresión de ECM son sistemas de administración de impresión que transfieren a ECM documentos legibles. Pueden utilizarse para imprimir informes de ChemStation en formato PDF.

Al agregar y configurar un servicio de impresión, éste aparece en su ordenador como impresora disponible. Al imprimir con los Servicios de impresión de ECM, se crea y carga automáticamente en el sistema ECM un archivo PDF. Además, también es posible configurar el sistema para que imprima copias en papel adicionales en una impresora convencional.

Los Servicios de impresión de ECM pueden instalarse en el servidor de ECM revisión 3.3.1 o posterior.

El *Servicio de impresión de ECM* consta de dos componentes:

- El *Gestor de servicios de impresión de ECM*, desde donde se pueden agregar y administrar impresoras para el servicio de impresión ECM.
- El *Servicio de impresión de ECM*, que supervisa una carpeta de la unidad de disco local. Cuando un servicio de impresión recibe un trabajo, el controlador lo imprime en un archivo de la carpeta de supervisión. A continuación, el servicio de impresión de ECM intercepta el archivo y lo carga en ECM. Para que un archivo se cargue en el programa de ECM, debe tener la extensión *.pdf.

Configuración de Servicios de impresión de ECM

Instalación de Servicios de impresión de ECM

La instalación y configuración de Servicios de impresión de ECM precisa los pasos siguientes: Los datos sobre la instalación se ofrecen en la documentación de Servicios de impresión de ECM.

1 Conéctese al servidor de ECM revisión 3.3.1 y seleccione la ficha **Administration**.

2 En la sección **Download** de la ficha **Administration**, seleccione **ECM Print Services** para ECM y ejecute la instalación. Siga las instrucciones del asistente para la instalación.

3 Una vez finalizada la instalación, aparecerá el icono de Servicios de impresión de ECM en la barra de tareas y Amyuni PDF Convert estará disponible como impresora (consulte **Start > Settings > Printers and Faxes > Amyuni PDF Converter)**.

4 Haga doble clic en el icono de Servicios de impresión de ECM. Se abre el cuadro de diálogo **ECM Login**.

5 Introduzca las credenciales de usuario necesarias y haga clic en **Login** para realizar la configuración.

Configuración de Servicios de impresión de ECM para usarlos con Amyuni PDF Converter

1 Cree una carpeta de supervisión en el sistema cliente de ECM de ChemStation. La carpeta no debe ubicarse en el directorio Chem32.

2 Haga clic con el botón secundario del ratón en el icono de Servicios de impresión de ECM de la barra de tareas y seleccione **Configure Printers**.

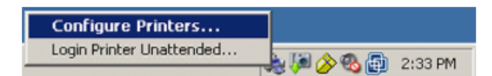


Figura 35 Icono de Servicios de impresión de ECM

3 Inicie sesión en **ECM Print Services**.

4 Seleccione el icono **Add Printer** y añada una impresora con los siguientes datos:

- **Type**: PDF Converter
- **Name**: indique un nombre exclusivo, p. ej., `Impresión Chem1`
- Defina las opciones de seguridad de la impresora conforme a las políticas de seguridad de la organización.

5 Haga clic en **Add** para continuar. Dependiendo de la configuración del ordenador, se mostrará un mensaje acerca del cuadro de diálogo **Browse for Folder**. Salga de este mensaje haciendo clic en **OK**.

6 En el siguiente cuadro de diálogo**Browse for Folder**, seleccione la carpeta de supervisión para el servicio de impresión de ECM.

7 Ahora la impresora ya se ha creado correctamente y estará disponible en el cuadro de diálogo **ECM Service**.

8 Haga clic con el botón secundario del ratón en el icono de Servicio de impresión de ECM de la barra de tareas y seleccione **Configure Printers** (consulte Figura 35 en la página 144).

9 Abra la configuración de la impresora marcando su impresora específica y seleccione la ficha **Configuration**. Para obtener más información, consulte la ayuda en línea de Servicios de impresión de ECM.

- **ECM**: es necesario especificar la ruta de datos (LCDF) de ECM en la que se almacenarán los archivos cargados después de la transferencia.
- **Settings**: parámetros específicos de la transferencia.
- **Hardcopy Printers**: también es posible obtener una impresión en papel.
- **Email**: se puede habilitar una notificación por correo electrónico.

10 Haga clic en **Apply** para utilizar la configuración para el servicio de impresión de ECM y salga del cuadro de diálogo haciendo clic en **OK**.

11 Cierre todos los cuadros de diálogo relacionados con las impresoras haciendo clic en **OK**.

12 Ya puede especificar en ChemStation la impresora que acaba de configurar desde el menú desplegable **File** en **Printer set up**. El Servicio de impresión de ECM se puede seleccionar como impresora específica; si la impresora se ha marcado como impresora predeterminada en la Configuración de Windows, ya estará definida como predeterminada en ChemStation.

Para establecer la impresora en el "modo desatendido"

Normalmente, al imprimir en un servicio de impresión de ECM, un cuadro de diálogo le pedirá que confirme la ubicación de la carga en ECM, así como algunos otros parámetros para cada informe. Si tiene pensado imprimir una secuencia completa de informes, puede configurar estos parámetros una sola vez para toda la serie y que la impresora funcione de forma desatendida durante un tiempo determinado. La duración del modo desatendido se define en la configuración del Servicio de impresión de ECM durante la instalación, pero puede modificarse en cualquier momento.

1 Haga clic con el botón secundario del ratón en el icono de Servicio de impresión de ECM de la barra de herramientas y seleccione **Login Printer Unattended**.

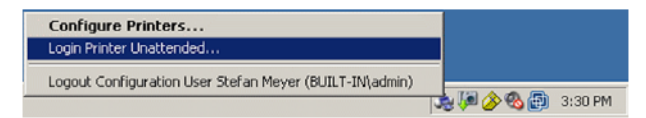


Figura 36 Definición del inicio de sesión del servicio de impresión

2 Seleccione la impresora que desee que funcione en modo desatendido.

3 Confirme la configuración del trabajo y haga clic en **OK**.

Configuración de Servicios de impresión de ECM - Adobe Distiller

1 Cree una carpeta de supervisión en el ordenador de ChemStation. La carpeta no debe ubicarse en el directorio Chem32.

2 Seleccione el icono **Add Printer** y añada una impresora con los datos:

- **Type**: Adobe Distiller
- **Name**: indique un nombre exclusivo, p. ej. Impresión Chem1
- Defina las opciones de seguridad de la impresora conforme a las políticas de seguridad de la organización.
- En el siguiente cuadro de diálogo **Add Port**, seleccione **Add Port** e indique la carpeta de supervisión especificada en el ordenador de ChemStation.

3 Haga clic en **Add** para continuar y busque la carpeta de supervisión del servicio de impresión de ECM.

4 Abra la configuración de la impresora marcando su impresora específica y seleccione la ficha **Configuration**.

- **ECM**: es necesario especificar la ruta de datos de ECM en la que se almacenarán los archivos cargados después de la transferencia.
- **Settings**: parámetros específicos de la transferencia.
- **Hardcopy Printers**: también es posible obtener una impresión en papel.
- **Email**: se puede habilitar una notificación por correo electrónico.

SUGERENCIA Para obtener más información, consulte la ayuda en línea de Servicios de impresión de ECM.

---

5 Haga clic en **Apply** para utilizar la configuración para el servicio de impresión y salga del cuadro de diálogo haciendo clic en **OK**.

6 Dependiendo de la versión de Acrobat Distiller que se utilice, se requerirán otros parámetros adicionales de configuración. Un mensaje solicita que se realicen determinadas tareas.

Ejemplo para Adobe Distiller Rev. 6.00:

En **Start > Settings > Printers**, abra las propiedades de la impresora que acaba de agregar. Seleccione **Print Preferences**.

- En los parámetros de conversión PDF, desactive **View Adobe PDF results.**
- En Formato de impresión de Adobe PDF, seleccione la ruta supervisada del ordenador de ChemStation.
- Seleccione **Edit** para los parámetros predeterminados. En el cuadro de diálogo **Adobe PDF Settings** que aparece, desactive **optimize for fast Web View** y guarde la configuración.

7 Cierre todos los cuadros de diálogo relacionados con las impresoras haciendo clic en **OK**.

8 Ya puede especificar en ChemStation la impresora que acaba de configurar desde el menú desplegable **File** en **Printer set up**. El Servicio de impresión de ECM se puede seleccionar como impresora específica; si la impresora se ha marcado como impresora predeterminada en la Configuración de Windows, ya estará definida como predeterminada en ChemStation.

Para establecer la impresora en el "modo desatendido"

Normalmente, al imprimir en un servicio de impresión, un cuadro de diálogo le pedirá que confirme la ubicación de la carga en ECM, así como otros parámetros más para cada informe. Si tiene pensado imprimir una secuencia completa de informes, puede configurar estos parámetros una sola vez para toda la serie y que la impresora funcione de forma desatendida durante un tiempo determinado. La duración del modo desatendido se define en la configuración del Servicio de impresión de ECM durante la instalación, pero puede modificarse en cualquier momento.

1 Haga clic con el botón secundario del ratón en el icono de Servicio de impresión de ECM de la barra de herramientas y seleccione **Login Printer Unattended** (consulte Figura 36 en la página 145).

2 Seleccione la impresora que desee que funcione en modo desatendido.

3 Confirme la configuración del trabajo y haga clic en **OK**.

Trabajar con Servicios de impresión de ECM en ChemStation

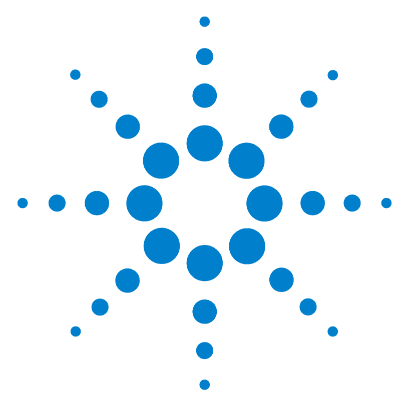
Al utilizar Servicios de impresión de ECM en ChemStation, cualquier informe que se imprima utilizando Servicios de impresión se convierte en un archivo *.pdf que se ubica en la carpeta supervisada y se transfiere mediante el servicio de impresión a la ubicación de ECM especificada. Durante la conversión a PDF, el nombre suministrado por el sistema es fijo. Dicho nombre se define del siguiente modo:

- análisis individuales: [nombre del archivo de datos].pdf
- análisis de secuencias: [nombre de la secuencia]_ [nombre del archivo de datos].pdf
- informes de resumen de secuencias: SSR_[nombre de la secuencia].pdf

La longitud máxima para estos nombres de informe generados automáticamente es de 30 caracteres; los nombres más largos se acortan. Si, debido al acortamiento, los nombres de archivos son iguales, el archivo existente se sobrescribe.

NOTA

Tenga en cuenta que al especificar el modelo de secuencia y el nombre de archivo de datos en la configuración de la secuencia, el nombre completo del archivo *.pdf no puede superar los 30 caracteres.



11
Diagnóstico y resolución de problemas

Problemas generales 150

El servidor de ECM no está disponible 150

Alertas y mensajes de error durante el arranque de ChemStation 151

Mensajes de error en el administrador de cola del spooler 152

En este capítulo se ofrecen algunas sugerencias elementales de diagnóstico y solución de problemas.

Problemas generales

El servidor de ECM no está disponible

Si el servidor de ECM no está disponible mientras trabaja con ChemStation, hay dos escenarios posibles.

El servidor de ECM no está disponible antes o durante el inicio de sesión.

Si el servidor de ECM no está disponible al iniciar la sesión en ECM desde ChemStation, el sistema no puede autenticar al usuario. El inicio de sesión se cancela y no se podrá acceder a las funciones de ECM en ChemStation; todos los elementos de menú relacionados con ECM estarán atenuados.

Para continuar con el diagnóstico y la solución de este problema, póngase en contacto con el administrador de ECM.

El servidor de ECM no está disponible después de iniciar la sesión

Si se interrumpe la conexión con el servidor de ECM una vez iniciada la sesión en ECM desde ChemStation, el sistema ECM ya ha autenticado al usuario. En este caso, ChemStation sabe que el usuario actual ha iniciado la sesión.

Cuando el servidor de ECM deja de estar disponible, ChemStation intenta restablecer la conexión del usuario automáticamente.

Las funciones de Cargar y Guardar de ECM estarán disponibles, pero una alerta indicará al usuario de la interrupción de la conexión con ECM.

Durante la adquisición de datos, no se puede completar la transferencia automática de datos a ECM. El usuario recibe un mensaje de error informándole de ello y deberá cargar manualmente los datos tan pronto como se restablezca la conexión (**ECM > Manage Queue**).

En cuanto el servidor de ECM vuelva a estar disponible, todas las tareas de ECM se habilitarán sin necesidad de reiniciar la aplicación. No es necesario volver a iniciar la sesión.

Para continuar con el diagnóstico y la solución de este problema, póngase en contacto con el administrador de ECM.

Alertas y mensajes de error durante el arranque de ChemStation

`Your Transfer Settings/Remote Data Path seems to be set to default`
`La configuración de transferencia/ruta de datos remotos parece estar establecida en su valor predeterminado`

En cada arranque, Agilent ChemStation comprueba si dispone de toda la información necesaria para transferir datos a ECM. Este mensaje aparece si la ruta de datos remotos no está definida o está incompleta.

Causa probable	Acciones recomendadas
1 La ruta de datos remotos no está definida o está incompleta.	Asegúrese de que la configuración de transferencia contenga la información del servidor de ECM, de la cuenta de ECM y una ruta LCDF completa (**ECM > Preferences > Transfer Settings**).

Mensajes de error en el administrador de cola del spooler

Account Mismatch
La cuenta no coincide

Causa probable	Acciones recomendadas
1 La configuración de la cuenta en las Preferencias difiere de la de la conexión actual (o no está conectado).	Corregir la configuración de transferencia y conectarse a ECM.

Host Mismatch
El host no coincide

Causa probable	Acciones recomendadas
1 El servidor de ECM de las Preferencias difiere de la de la conexión actual (o no está conectado).	Corregir la configuración de transferencia y conectarse a ECM

The queue already contains items
La cola ya contiene elementos

Causa probable	Acciones recomendadas
1 La cola contiene elementos que se han añadido antes que el elemento actual.	Procesar la cola en el orden correcto. En caso necesario, exportar elementos que no puedan resolverse.

Invalid license ID or license has expired.
El Id. de licencia no es válido o la licencia ha caducado.

Causa probable	Acciones recomendadas
1 Tiempo de espera de licencia del servidor agotado.	Desconéctese y vuelva a iniciar la sesión.

You do not have permission to create a new Drawer/Folder.
No tiene permiso para crear un Cajón/Carpeta nuevo.

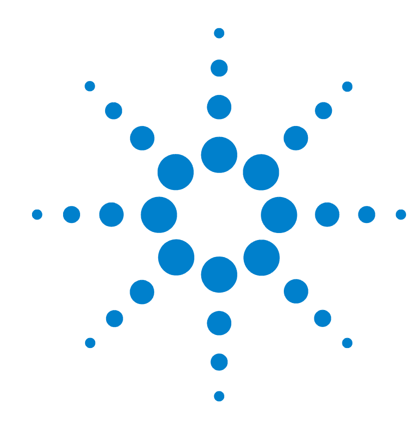
Causa probable	Acciones recomendadas
1 No dispone de los privilegios apropiados para crear el Cajón o la Carpeta.	Solicitar a un administrador la concesión de los privilegios correspondientes o la creación de los directorios necesarios.

You do not have permission to add files.
No tiene permiso para agregar archivos.

Causa probable	Acciones recomendadas
1 No dispone de los privilegios apropiados para guardar archivos en la ubicación de ECM especificada.	Solicitar a un administrador que le conceda los privilegios correspondientes.

Unable to upload (filename). This file is currently checked out to another user and may not be updated. (error -1).
No se puede cargar (nombre del archivo). Este archivo está verificado actualmente para otro usuario y no se puede actualizar. (error -1).

Causa probable	Acciones recomendadas
1 Otro usuario ha verificado el archivo.	El otro usuario tiene que verificar el archivo antes de que usted pueda cargarlo.



12
Apéndice

Privilegios de ChemStation en ECM 156

Funciones de ChemStation en ECM 159

Privilegios relacionados con ECM respecto a la configuración de ChemStation 163



Privilegios de ChemStation en ECM

Privilegio	Descripción
CS: Audit Trail	**Run**: habilita el registro de auditoría para un método específico
CS: Batch	**Run**: habilita todas las operaciones en la vista Lote
CS: Break Session Lock	**Run**: desbloquea una sesión de ChemStation bloqueada por otros usuarios
CS: Calibration	**Edit**: crea y modifica la tabla de calibración; cambia la configuración de la calibración
CS: Command Line	**Run**: activa/desactiva la línea de comandos
CS: Companion	**View**: accede a la vista Guía (sólo con ChemStation para GC)
CS: Control	**View**: accede a la vista Método y control de análisis
CS: Data	**Edit**: almacenamiento interactivo de datos en ECM **Delete**: borra archivos de datos del explorador de ChemStation
CS: Data Analysis	**Run**: accede a la vista Análisis de datos
CS: Diagnostic	**View**: accede a la vista Diagnóstico
CS: Full Menu	**Run**: habilita el menú completo de ChemStation
CS: Instrument Configuration	**Edit**: modifica los parámetros de configuración de instrumentos
CS: Instrument Setup	**Edit**: modifica los parámetros de método de instrumentos
CS: Integration Events	**Edit**: modifica los eventos de integración y realiza la integración automática
CS: Ion Labels	**Edit**: edita las opciones de las etiquetas de iones (sólo para LC/MS)

Privilegio	Descripción
CS: Logbook	**Edit**: guarda el libro de registro actual **Delete**: borra el libro de registro actual
CS: Manage Transfer Queue	**Run**: accede a los siguientes elementos del administrador de la cola del spooler • Guardar elemento seleccionado localmente • Eliminar elemento seleccionado • Propiedades
CS: Manual Integration	**Run**: realiza una integración manual
CS: Method	**Edit**: guarda los cambios del método (incluye *Actualización de secuencia/método maestro* en la vista Análisis de datos) **Delete**: borra un método del explorador de ChemStation
CS: Method Properties	**Edit**: modifica la lista de control de análisis y la información del método
CS: Print Report	**Run**: imprimir/previsualizar un informe
CS: Recalibration	**Run**: realiza una recalibración interactiva
CS: Report	**Edit**: modifica el cálculo/estilo de impresión de un informe y edita el cuadro de diálogo de curvas del instrumento
CS: Report Layout	**View**: accede a la vista Diseño del informe
CS: Report Template	**Edit**: guarda una plantilla de informe
CS: Reprocess	**Run**: reprocesa una secuencia
CS: Retention Time Lock	**Edit**: accede al menú de bloqueo del tiempo de retención (sólo para GC)
CS: Retention Time Search	**Edit**: accede al menú de búsqueda del tiempo de retención (sólo para GC)
CS: Run	**Run**: inicia la adquisición (muestra o secuencia individual)
CS: Sequence	**Edit**: guarda secuencias **Delete**: borra secuencias del explorador de ChemStation

Privilegio	Descripción
CS: Sequence Summary	**Edit**: modifica el informe de resumen de secuencias y la configuración de estadísticas ampliada
CS: System Suitability	**Edit**: edita los rangos de ruido y los límites de rendimiento
CS: Transfer Preference	**Edit**: Editar la configuración de transferencia en las preferencias
CS: Tune	**View**: accede a la vista Sintonización (sólo en ChemStation para LC-MSD)
CS: Verification	**View**: accede a la vista Verificación (OQ/PV)

Funciones de ChemStation en ECM

Tenga en cuenta: las funciones predeterminadas de ChemStation no cuentan con ningún privilegio de ECM.

Tabla 3 Privilegios predeterminados de administrador de CS

Privilegio	Vista	Editar	Eliminar	Agregar	Análisis
CS: Audit Trail					X
CS: Break Session Lock					X
CS: Command Line					X
CS: Control	X				
CS: Data		X	X		
CS: Data Analysis	X				
CS: Diagnostic	X				
CS: Full Menu					X
CS: Instrument Setup		X			
CS. Logbook		X	X		
CS: Manage Transfer Queue					X
CS: Manual Integration					X
CS: Method		X	X		
CS: Method Properties		X			
CS: Print Report					X
CS: Report Layout	X				
CS: Report Template		X			
CS: Sequence			X		
CS: Transfer Preferences		X			

Tabla 4 Privilegios predeterminados de analista de CS

Privilegio	Vista	Editar	Eliminar	Agregar	Análisis
CS: Batch					X
CS: Calibration		X			
CS: Control	X				
CS: Data		X			
CS: Data Analysis	X				
CS: Full Menu					X
CS: Instrument Setup		X			
CS: Integration Events		X			
CS. Logbook		X			
CS: Manual Integration					X
CS: Method		X	X		
CS: Method Properties		X			
CS: Print Report					X
CS: Recalibration					X
CS: Report		X			
CS: Report Layout	X				
CS: Report Template		X			
CS: Reprocess					X
CS: Run					X
CS: Sequence		X	X		
CS: Sequence Summary		X			
CS: System Suitability		X			

Tabla 5 Privilegios predeterminados del gestor de laboratorios de CS

Privilegio	Vista	Editar	Eliminar	Agregar	Análisis
CS: Audit Trail					X
CS: Batch					X
CS: Break Session Lock					X
CS: Calibration		X			
CS: Command Line					X
CS: Companion	X				
CS: Control	X				
CS: Data		X	X		
CS: Data Analysis	X				
CS: Diagnostic	X				
CS: Full Menu					X
CS: Instrument Configuration		X			
CS: Instrument Setup		X			
CS: Integration Events		X			
CS. Logbook		X	X		
CS: Manage Transfer Queue					X
CS: Manual Integration					X
CS: Method		X	X		
CS: Method Properties		X			
CS: Print Report					X
CS: Report		X			
CS: Report Layout	X				
CS: Report Template		X			
CS: Reprocess					X
CS: Run					X

Tabla 5 Privilegios predeterminados del gestor de laboratorios de CS

Privilegio	Vista	Editar	Eliminar	Agregar	Análisis
CS: Sequence		X	X		
CS: Sequence Summary		X			
CS: System Suitability		X			
CS: Transfer Preferences		X			
CS: Tune	X				
CS: Verification	X				

Tabla 6 Privilegios predeterminados de operador de CS

Privilegio	Vista	Editar	Eliminar	Agregar	Análisis
CS: Control	X				
CS: Data		X			
CS: Print Report					X
CS: Run					X
CS: Sequence		X			
CS: Sequence Summary		X			

Privilegios relacionados con ECM respecto a la configuración de ChemStation

Los privilegios que se describen en la tabla siguiente deben asignarse al menos a una de las funciones para que se activen.

Tabla 7 Lista de privilegios relacionados con ECM

Privilegio	Vista	Editar	Eliminar	Agregar	Análisis	Descripción
Content: File	X			X		• Privilegios mínimos para que ChemStation acceda a ECM • Privilegios para ver propiedades de ECM en ChemStation
Content: File Filtering		X				• Privilegios mínimos para que ChemStation acceda a ECM • Privilegio para agregar manualmente archivos a una carpeta de ECM
Content: File Revisions	X					• Privilegio para ver revisiones en ChemStation
Content: File Type [XLS]		X		X		• Privilegio para agregar y verificar archivos con la extensión .xls
Content: Folder	X	X		X		• Privilegios mínimos para que ChemStation acceda a ECM • Privilegio para ver Propiedades de ECM en ChemStation
Content: Folder Access Properties		X				• Privilegio para ver y modificar la ficha de propiedades de cualquier carpeta
Content: Rekey File					X	• Privilegio para volver a asignar clave a archivos en ECM, p. ej., con filtros XML
System: Advanced Search					X	• Privilegio para utilizar la búsqueda avanzada en ChemStation
System: Audit Trail	X					• Privilegio para ver Propiedades de ECM en ChemStation

Tabla 7 Lista de privilegios relacionados con ECM

Privilegio	Vista	Editar	Eliminar	Agregar	Análisis	Descripción
System: Filtering Configuration	X					• Privilegio para ver o modificar la configuración de filtrado • Privilegio para utilizar servicios de extracción de atributos y administrar atributos definidos por el usuario
System: indexing Configuration	X					• Privilegios mínimos para que ChemStation acceda a ECM • Privilegio para ver Propiedades de ECM en ChemStation
System: Quick Search					X	• Privilegio para utilizar la búsqueda rápida en ChemStation
System: Super Object	X					• Privilegio obligatorio para OLIR
System: Project	X					• Privilegio para ver proyectos en OLIR
System: Project Access	X					• Privilegio para acceder a proyectos en OLIR

Glosario UI

#

of signatures
  Nº de firmas

:

:Approver
  :Autorizador
:Contributor
  :Contribuyente
:Reader
  :Lector

"

"Anyone who uses this computer (all users)"
  "Cualquiera que use este equipo (todos los usuarios)"

A

Account
  Cuenta
Account Administration
  Administración de cuenta
Activity Log > Audit Trail
  Registro de actividad > Registro de auditoría
Activity Log > System Log
  Registro de actividad > Registro del sistema
Add
  Agregar
Add Compound Custom fields
  Agregar campos personalizados de compuestos
Add File
  Agregar archivo
Add Folder
  Agregar carpeta
Add or Remove Programs
  Agregar o quitar programas
Add Port
  Agregar puerto
Add Printer
  Agregar impresora
Add Sample Custom fields to Sample info
  Agregar campos personalizados de muestras a la información de muestra
Add to Group...
  Agregar a grupo...
Administration
  Administración
Administrators
  Administradores
Adobe PDF Settings
  Configuración de Adobe PDF
Advanced
  Opciones avanzadas
After Acquisition
  Después de la adquisición
After Acquisition.
  Después de la adquisición.
After Any Data Modification
  Después de cualquier modificación de datos
After Reprocessing
  Después del reprocesamiento
Agilent ChemStation Setup Wizard
  Asistente para la instalación de Agilent ChemStation
Apply
  Aplicar
Audit Trail
  Registro de auditoría
Audit Trail Status
  Estado del registro de auditoría
Automatic import after reprocessing
  Importación automática después del reprocesamiento
Automatic transfer after acquisition
  Transferencia automática después de la adquisición
Automatic transfer after any data modification
  Transferencia automática después de cualquier modificación de datos
Automatic transfer after reprocessing
  Transferencia automática después del reprocesamiento
Available in folder access tab
  Disponible en la ficha de acceso de la carpeta

B

Break Session Lock
  Anular bloqueo de sesión
Browse for Folder
  Buscar carpeta

C

Calculate peak performance
  Calcular el rendimiento del pico
Calculate Peak Performance
  Calcular el rendimiento del pico

Cancel
    Cancelar
Change User ...
    Cambiar usuario ...
Changed
    Cambio
checked out
    verificados
ChemStation Administration Tool
    Herramienta de administración de ChemStation
ChemStation OpenLAB Option
    Opción ChemStation OpenLAB
Cleanup Data
    Limpiar datos
Cleanup Data on Shutdown
    Limpiar datos al apagar
Command Description
    Descripción del comando
Commit
    Asignar
Compound Custom Fields
    Campos personalizados de compuestos
Computer Management
    Administración de equipos
Configuration
    Configuración
Configure Printers
    Configurar impresoras
Consecutive signature timeout
    Tiempo de espera para firmas consecutivas
Content
    Contenido
Content: Add Folder
    Contenido: Privilegio
Content: File
    Contenido: Archivo
Content: File Filtering
    Contenido: Filtrado de archivos
Content: File Revisions
    Contenido: Revisiones de archivos
Content: File Signatures
    Contenido: Firmas de archivo
Content: File Type [XLS]
    Contenido: Tipo de archivo [XLS]
Content: Folder
    Contenido: Carpeta
Content: Folder Access Properties
    Contenido: Propiedades de acceso de carpetas
Content: Rekey File
    Contenido: Volver a asignar clave a archivos
Contributor
    Contribuidor
Create OpenLAB Intelligence Report
    Crear informe de inteligencia de OpenLAB
Create OpenLAB IR Report
    Crear informe de OpenLAB IR
Created
    Creación
CS. Logbook
    CS. Libro de registro
CS: Audit Trail
    CS: Registro de auditoría
CS: Batch
    CS: Lote
CS: Break Session Lock
    CS: Anular bloqueo de sesión
CS: Calibration
    CS: Calibración
CS: Command Line
    CS: Línea de comandos
CS: Companion
    CS: Guía
CS: Data
    CS: Datos
CS: Data Analysis
    CS: Análisis de datos
CS: Diagnostic
    CS: Diagnóstico
CS: Full Menu
    CS: Menú completo
CS: Instrument Configuration
    CS: Configuración de instrumentos
CS: Instrument Setup
    CS: Configuración de instrumentos
CS: Integration Events
    CS: Eventos de integración
CS: Ion Labels
    CS: Etiquetas de iones
CS: Logbook
    CS: Libro de registro
CS: Manage Transfer Queue
    CS: Administrar cola de transferencia
CS: Manual Integration
    CS: Integración manual
CS: Method
    CS: Método
CS: Method Properties
    CS: Propiedades de método
CS: Print Report
    CS: Imprimir informe
CS: Recalibration
    CS: Recalibración
CS: Report
    CS: Informe
CS: Report Layout
    CS: Diseño del informe
CS: Report Template
    CS: Plantilla de informe
CS: Reprocess
    CS: Reprocesar
CS: Retention Time Lock
    CS: Bloqueo de tiempo de retención

CS: Retention Time Search
CS: Búsqueda de tiempo de retención

CS: Run
CS: Análisis

CS: Sequence
CS: Secuencia

CS: Sequence Summary
CS: Resumen de secuencias

CS: System Suitability
CS: Idoneidad del sistema

CS: Transfer Preference
CS: Preferencias de transferencia

CS: Transfer Preferences
CS: Preferencias de transferencia

CS: Tune
CS: Sintonización

CS: Verification
CS: Verificación

Custom Fields
Campos personalizados

D

Data Analysis
Análisis de datos

Data Cleanup
Limpieza de datos

Database name (host string):
Nombre de la base de datos (cadena del host):

Database User Name
Nombre de usuario de la base de datos

Default reason
Motivo predeterminado

Default reasons
Motivos predeterminados

Delete
Eliminar

Description
Descripción

Detail
Detalles

Details
Datos

Diagnosis
Diagnóstico

Directories
Directorios

Directory
Directorio

Directory and Name for log file
Directorio y nombre del archivo de registro

Download
Descargar

E

ECM > Create OpenLAB Intelligence Report
ECM > Crear informe de inteligencia de OpenLAB

ECM > Load Data
ECM > Cargar datos

ECM > Lock Session > non privately
ECM > Bloquear sesión > no en privado

ECM > Lock Session > privately
ECM > Bloquear sesión > en privado

ECM > Manage Queue
ECM > Administrar cola

ECM > Preferences > Transfer Settings
ECM > Preferencias > Configuración de transferencia

ECM > Save Method
ECM > Guardar método

ECM > Update Methods ...
ECM > Actualizar métodos ...

ECM Database Name
Nombre de base de datos de ECM:

ECM Database Server
Servidor de base de datos de ECM

ECM Desktop Open
Abrir escritorio de ECM

ECM forced upload
Carga forzada en ECM

ECM Information
Información de ECM

ECM Login
Iniciar sesión en ECM

ECM Open
Abrir en ECM

ECM Print Services
Servicios de impresión de ECM

ECM Save
Guardar en ECM

ECM Service
Servicio de ECM

ECM Version
Versión de ECM

ECM > Save Sequence Template
ECM > Guardar plantilla de secuencia

Edit
Editar

Electronic Signature
Firma electrónica

Electronically Sign > Acrobat Plug-In Signature
Firmar electrónicamente > Firma de complemento de Acrobat

Electronically Sign > Electronic Signature
Firmar electrónicamente > Firma electrónica

Email
Correo electrónico

Enable Audit Trail
Habilitar registro de auditoría

Enable audit trail for this account
Habilitar registro de auditoría para esta cuenta

Enable Audit Trail for this method
: Habilitar registro de auditoría para este método

Enable Method Audit Trail for all methods
: Habilitar registro de auditoría para todos los métodos

Enable Results Audit Trail
: Habilitar registro de auditoría de resultados

End Date
: Fecha de finalización

eSig
: Firma electrónica

Extended Performance
: Rendimiento ampliado

F

File
: Archivo

File Properties
: Propiedades de archivo

File Versions
: Versiones de archivo

Finish
: Finalizar

G

General Addon products
: Productos de expansión generales

Get Server
: Obtener servidor

H

Hardcopy Printers
: Impresoras de copias en papel

I

Import
: Importar

Import after Reprocessing
: Importación después del reprocesamiento

Inactivity Timeout
: Tiempo de espera de inactividad

Install
: Instalar

Installation finished
: Instalación finalizada

L

Last Error
: Último error

Last Modified
: Última modificación

load
: cargar

Load
: Cargar

Load Data ...
: Cargar datos ...

Load Method ...
: Cargar método ...

Load Sequence Template ...
: Cargar plantilla de secuencias ...

Local Version
: Versión local

Locally Modified
: Modificación local

location
: ubicación

Lock Session
: Bloquear sesión

Lockout
: Bloqueo

Log In ...
: Iniciar sesión ...

Log on to
: Inicie sesión en

Log out
: Cerrar sesión

Login
: Iniciar sesión

Login Printer Unattended
: Iniciar sesión en impresora desatendida

M

Manage Queue
: Administrar cola

Manage Queue on Connect
: Administrar cola al conectar

Mandatory
: Obligatorio

Mandatory Login
: Inicio de sesión obligatorio

Messages and Warnings
: Mensajes y avisos

Method
: Método

Method > Custom Fields Setup
: Método > Configuración de campos personalizados

Method > Enable Audit Trail
: Método > Habilitar registro de auditoría

Method > Method Audit Trail
: Método > Registro de auditoría de métodos

Method and Run Control
: Método y control de análisis

Minimum Password Length
: Longitud mínima de contraseña

Modify...
: Modificar...

Multiple Sequence Summary Report
: Informe de resumen de varias secuencias

N

Name
    Nombre
Next
    Siguiente

O

OK
    Aceptar
Open
    Abrir
Open As Checked Out
    Abrir como verificado
Open Revisions
    Abrir revisiones
OpenLAB Intelligence Report Template
    plantilla de informe de inteligencia de OpenLAB
OpenLAB Intelligence Reporter Template
    Plantilla del generador de informes de inteligencia de OpenLAB
Operator
    Operador
optimize for fast Web View
    Optimizar para una visualización web rápida

P

Password
    Contraseña
Password for database user
    Contraseña para el usuario de base de datos
Path
    Ruta
Path and filename of the log file
    Ruta y nombre del archivo de registro
Performance
    Rendimiento
Preferences
    Preferencias
Preview at end of sequence
    Previsualizar al final de la secuencia
Print individual report for each run as well
    Imprimir también informe individual para cada análisis
Print Preferences
    Preferencias de impresión
Print sequence summary report
    Imprimir informe de resumen de secuencias
Printer set up
    Configurar impresora
Processed last at
    Procesado por última vez el
Project
    Proyecto
Properties
    Propiedades

Q

Queue Management
    Administración de la cola
Queue Management Details
    Datos de administración de cola
Queued at
    En cola desde

R

Reader
    Lector
reason
    motivo
Reasons
    Motivos
Remote Data Path
    Ruta de datos remotos
Remove
    Quitar
Report
    Informe
Report > Report History
    Informe > Historial de informes
Report > Specify Report
    Informe > Especificar informe
Report History
    Historial de informes
Report Layout
    Diseño del informe
Report to file
    Informe a archivo
Report to HTM
    Informe a HTM
Report to PDF
    Informe a PDF
Report to printer
    Informe a impresora
Reprocessing Copy
    Reprocesamiento de copia
Require entry in Reason fields
    Exigir una entrada en los campos de motivo
Reset Role
    Restaurar función
Reset Roles
    Restaurar funciones
Roles
    Funciones
Run
    Análisis

S

Sample Custom Fields
    Campos personalizados de muestras
Save
    Guardar

Save Data
: Guardar datos

Save Data As ...
: Guardar datos como ...

Save Method
: Guardar método

Save Sequence Template
: Guardar plantilla de secuencias

Schema/user name for ECM
: Esquema/nombre de usuario para ECM

Search
: Buscar

Select Destination
: Seleccionar destino

Select Method Patch
: Seleccionar patch del método

Select Path
: Seleccionar ruta

Select Sequence Template
: Seleccionar plantilla de secuencias

Select Source
: Seleccionar origen

Sequence
: Secuencia

Sequence > Sequence Output
: Secuencia > Resultado de secuencia

Sequence > Sequence Table
: Secuencia > Tabla de secuencia

Sequence Container Migration
: Migración del contenedor de secuencias

Sequence Data
: Datos de secuencia

Sequence Output
: Resultado de secuencia

Sequence Parameter
: Parámetro de secuencia

Sequence Parameters
: Parámetros de secuencia

Server
: Servidor

Server URL
: URL del servidor

Set up Custom Fields definitions
: Configurar definiciones de campos personalizados

Set up Custom Fields values
: Configurar valores de campos personalizados

Settings
: Configuración

Setup Wizard - Instruments
: Asistente de instalación - Instrumentos

Setup Wizard - Licenses
: Asistente de instalación - Licencias

Sign
: Firmar

Signature screen timeout
: Tiempo de espera de la pantalla de firma

Single Sequence OpenLAB Summary Report
: Informe de resumen de OpenLab de secuencia individual

Spooler Queue Manager
: Administrador de cola del spooler

Start > All Programs > Agilent ChemStation > Add instrument
: Inicio > Todos los programas > Agilent ChemStation > Agregar instrumento

Start > All Programs > Agilent ChemStation > ChemStation Administration Tool
: Inicio > Todos los programas > Agilent ChemStation > Herramienta de administración de ChemStation

Start > Run
: Inicio > Ejecutar

Start > Settings > Control Panel > Add or Remove Programs
: Inicio > Configuración > Panel de control > Agregar o quitar programas

Start > Settings > Control Panel > Administrative Tools > Computer Management
: Inicio > Configuración > Panel de control > Herramientas administrativas > Administración de equipos

Start > Settings > Printers
: Inicio > Configuración > Impresoras

Start > Settings > Printers and Faxes > Amyuni PDF Converter)
: Inicio > Configuración > Impresoras y faxes > Amyuni PDF Converter)

Start ChemStation when ECM is unavailable
: Iniciar ChemStation cuando ECM no esté disponible

Start Date
: Fecha de inicio

Start OpenLAB IR
: Iniciar OpenLAB IR

Study
: Estudio

Study/Project Summary Report
: Informe de resumen de estudio/proyecto

Summary
: Resumen

System
: Sistema

System administrator email
: Correo electrónico del administrador del sistema

System Diagram
: Diagrama del sistema

System: Advanced Search
: Sistema: Búsqueda avanzada

System: Audit Trail
: Sistema: Registro de auditoría

System: Filtering Configuration
Sistema: Configuración de filtrado
System: indexing Configuration
Sistema: Configuración de indexación
System: Project
Sistema: Proyecto
System: Project Access
Sistema: Acceso a proyectos
System: Quick Search
Sistema: Búsqueda rápida
System: Super Object
Sistema: Súper objeto

T

Timebased session lock locks private
Bloqueo de sesión en función del tiempo con bloqueo privado
Toolbar Lock Button locks private
Botón de bloqueo de la barra de herramientas con bloqueo privado
Transfer Settings
Configuración de transferencia
Type
Tipo

U

Unique Folder Creation
Creación de carpeta única
Unique Folder Creation OFF
Desactivar creación de carpeta única
Update from ECM
Actualizar de ECM
Update Methods ...
Actualizar métodos ...
Update Sequence Templates ...
Actualizar plantillas de secuencias ...
Update Sequences Templates ...
Actualizar plantillas de secuencias ...
Use instance specific settings
Utilizar parámetros específicos de instancia
Use Preferences
Utilizar preferencias
Use these settings for all instances on this computer
Utilizar estos parámetros para todas las instancias de este ordenador
User Account Control
Control de cuenta de usuario
User can specify reason
El usuario puede especificar un motivo
User name
Nombre de usuario
User Preferences
Preferencias de usuario
User specified
Especificada por el usuario
Username:
Nombre de usuario:
Users / Groups / Roles
Usuarios/Grupos/Funciones
Users/Groups/Roles
Usuarios/Grupos/Funciones

V

Verification (OQ/PV)
Verificación (OQ/PV)
View
Ver
View > Current Data File Logbook
Ver > Libro de registro del archivo de datos actual
View > Preferences
Ver > Preferencias
View Adobe PDF results.
Ver resultados de Adobe PDF.

Y

Yes
Sí

Índice

A

ACAML
- filtro 137

acceso no autorizado 40
acceso 40
actualizar métodos 44
actualizar secuencias 44
administrador de cola del spooler 52
administrar cola 45, 51
AES 133, 134
anular bloqueo de sesión 99
archivador 16, 49
autenticación 40

B

Base de datos de ECM 22
bloqueado en privado 42
bloqueado no en privado 42
bloqueo de sesión 42, 99
bloqueo en función del tiempo 42, 99
bloqueo 42, 94
búsqueda rápida 134

C

cajón 16, 49
calcular el rendimiento del pico 50
campos personalizados 106
Carga forzada en ECM 66
cargar datos 67
cargar método 76
carpeta de supervisión 144
carpeta 16, 49, 96
certificado de software 32
ChemStore 21
clave de licencia 31
claves de filtro 134
claves 134
cliente del generador de informes 130
Cliente web de ECM 11, 16, 29
cliente web 11, 16, 29
configuración de cuentas 93
configuración de transferencia 46, 49
contenedor de secuencias 58
contraseña 41, 95
correo electrónico del administrador del sistema 94
Crear informe de inteligencia de OpenLAB 123
Crear informe de OpenLAB IR 131
CSAdministrators 35
Cuadro de diálogo Abrir escritorio de ECM 68, 76
Cuadro de diálogo Agregar archivo 74, 79
Cuenta de ECM 24, 48
cuenta 24, 41, 93

D

desinstalación 37
después de cualquier modificación de datos 65, 70
después de la adquisición 49, 62, 65
después de una modificación de datos 50
después del reprocesamiento 50, 70
disponible en la ficha de acceso de carpeta 96
dominio 41

E

Easy Access 21
ECM no disponible
- iniciar ChemStation 99

ECM 10
ejemplos de informe 125
elaboración de informes de campos personalizados 112
elaboración de informes 112
elementos del menú atenuados 150
estado de verificación 68, 76
exigir una entrada en los campos de motivo 94
expresión de búsqueda 135

F

Filtro ACAML 137
Filtro de ChemStation 134
firma electrónica 17, 82, 101
flujos de trabajo
- métodos y plantillas de secuencias 14, 73
- OpenLAB IR 124
- relacionados con los datos 12, 61

formato de archivo 58
Formato PDF 141
Función Contribuyente 26, 96
Función Lector 26
función 24, 25, 26, 94, 96

G

Generador de informes de inteligencia de OpenLAB 122
grupo 35, 94
guardar método 78

H

Herramienta de administración de ChemStation 32, 34, 97
herramienta de administración 32, 34, 97
historial de informes 89

I

importación después del reprocesamiento 50, 71
impresora predeterminada 147
informe 129
Iniciar OpenLAB IR 131
iniciar sesión 33, 40, 99
inicio de sesión obligatorio 33, 98
instalación
  en un ordenador de ChemStation 28
  en un servidor de ECM 22
interfase de usuario
  opción OpenLAB 43
  OpenLAB IR 130

L

LCDF 16, 27, 47
libro de registro de archivos de datos 89
libro de registro 87
limpiar datos 45, 51
longitud mínima de contraseña 94

M

mensajes de error 151
Menú de ECM 44
metadatos 133
Microsoft .NET Framework 30
modo desatendido 145, 147

N

nombre de usuario 41
Norma 21 CFR, Parte 11 17, 82

O

Opción OpenLAB 11
Operador de ChemStation 41
operador 41
Oracle 22

P

paquete de registro 32
Parte 11 17, 82
pasos de configuración para la Parte 11 85
PDF-XChange 30
plantilla de informe 130
preferencias de usuario 103
preferencias 46
Privilegio Agregar carpeta. 27
privilegio 25, 27, 101
Purify 21

R

registro de actividades 91, 91
Registro de auditoría de ECM 90
registro de auditoría de métodos 87
registro de auditoría de resultados 88
registro de auditoría 17, 87
registro del sistema ECM 91
registro del sistema 91
registro 32
report.txt 139
requisitos previos
  OpenLAB IR 124
requisitos
  Opción OpenLAB 20
result.xml 138
run.log 89
ruta de datos remotos 16, 46, 47
ruta 16, 46, 48

S

señal 48
servicio de extracción de atributos 133, 134
Servicios de impresión de ECM 142
servicios de impresión 142
Servidor de ECM 48
servidor no disponible 150
sistema abierto 83
sistema cerrado 83
sistema de administración de impresión 142
software de servidor 20
SQLCmd 23
SQLPlus 22
SQLServer 23
ssizip 58, 60

T

tiempo de espera de firmas consecutivas 102
tiempo de espera de inactividad 94
tiempo de espera de la pantalla de firma 102
tiempo de espera 94, 102
tipos de búsqueda 134

U

ubicación 16, 49
URL del servidor 41

URL 41
Usuario de ECM 41
usuario 25, 41, 94

V

valores de campos personalizados 110
verificado 68, 76, 78
Versiones de ECM 20
vista diagnóstico 44
Vista OQ/PV 44

www.agilent.com

En este manual

Esta guía contiene información de referencia y sobre la instalación de la interfaz del Gestor de contenidos empresariales (ECM) entre Agilent ChemStation y un sistema cliente/servidor de ECM de Agilent.

Printed in Germany
04/2010



G2170-95036

